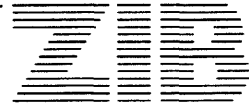


Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin
Heilbronner Str. 10, D-1000 Berlin 31



Jahresbericht 1989



Herausgegeben vom
Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin
Heilbronner Strasse 10
1000 Berlin 31
Verantwortlich: Dr. Klaus André
Umschlagsatz und Druck: Rabe KG Buch- und Offsetdruck Berlin

ISSN 0934-5892

1.	Vorbemerkung.....	1
2.	Forschung und Entwicklung	2
2.1	Abteilungen.....	2
	Numerik.....	2
	Symbolik.....	2
	Numerische Software-Entwicklung.....	3
	Software-Information.....	3
	Graphik.....	3
	Systolik.....	3
	Verteilte Systeme.....	3
2.2	Projekte	4
	Adaptive Finite-Element-Methoden für partielle Differentialgleichungen.....	4
	Diskrete Galerkin-Methoden zur Lösung abzählbarer Systeme von Differentialgleichungen.....	7
	Newton-Algorithmen für hoch-nichtlineare Probleme.....	7
	Numerische Lösung freier Randwertprobleme	8
	Extrapolationsmethoden für gewöhnliche Differentialgleichungen und differentiell-algebraische Systeme.....	9
	Numerisch-symbolische Berechnung dynamischer Systeme	10
	Symbolische Präprozessoren für numerische Algorithmen	10
	Symbolische Modellierung chemischer Reaktionssysteme.....	11
	Symbolische Lösung polynomialer Gleichungssysteme	11
	Parallele Algorithmen der Computer Algebra.....	12
	Parallelisierung adaptiver numerischer Algorithmen.....	12
	Museumsdokumentation	12
	Europäische Normung von LISP	13
	Implementierung und Vertrieb von REDUCE / PSL.....	13
	Elektronische Softwarebibliothek eLib.....	14
	Graphik-Software.....	15
	BERGATE.....	16

Multimedia-Dokumente im ISDN-B (MMD)	17
3. Anlagenbetrieb	18
3.1 Übersicht.....	18
3.2 Nutzung der CRAY X-MP/24.....	21
3.2.1 Verteilung der Gesamtleistung auf die Partner	21
3.2.2 Systemauslastung, Vergleich COS - UNICOS.....	22
3.2.3 Fachbereiche mit großem Rechenzeitverbrauch	23
3.2.4 Verteilung auf Fachgebiete.....	26
3.3 Kooperationen.....	27
3.3.1 Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)	27
3.3.2 Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH (HMI).....	27
4. Wissenschaftlich-Technische Dienste	29
4.1 Bibliothek	29
4.2 Reportwesen.....	29
4.3 Elektronik-Labor	29
5. Veröffentlichungen, Vorträge, verfügbare Produkte	31
5.1 Preprints.....	31
5.2 Technical Reports	33
5.3 Sonstige Reports	36
5.4 Veröffentlichungen.....	36
5.5 Vorträge	37
5.6 Verfügbare Produkte.....	42
5.7 Gastvorträge im ZIB.....	43
5.8 Arbeitskreise, Kurse, Tagungen im ZIB	45
5.9 Informationsbesuche / Präsentationen im ZIB.....	45
5.10 Gäste.....	45
5.11 Zeitschrift IMPACT.....	46

6.	Organisatorisches	49
6.1	Organe.....	49
6.2	Wissenschaftlicher Beirat	49
6.3	Personalrat	50
6.4	ZIB-Fellows.....	50
6.5	Mitgliedschaften.....	50
6.6	Wirtschaftliche Situation	51
6.7	Personal	51
6.8	Organisationsplan.....	52



1. Vorbemerkung

Das Berichtsjahr 1989 war das *dritte* Jahr, in dem das Konrad-Zuse-Zentrum mit neuer Struktur und Zielsetzung tätig war. Verglichen mit den Jahresberichten 1987 und 1988 zeigt sich, daß der neugegründete Bereich Forschung und Entwicklung mit Schwerpunkt *Scientific Computing* weiterhin einen erfreulichen Aufschwung genommen hat - ohne daß andere Bereiche an Qualität eingebüßt hätten. Die Abteilungen *Numerik* und *Symbolik* haben sich inzwischen ihren internationalen Rang gesichert. Die beiden zu Anfang des Berichtsjahres neu entstandenen Abteilungen *Numerische Software-Entwicklung* und *Software-Information* sind auf dem besten Weg. Das Konrad-Zuse-Zentrum als Ganzes hat sich inzwischen einen internationalen Namen gemacht - ein Resultat der Bemühungen aller einzelner Mitarbeiter und der konstruktiven Zusammenarbeit sämtlicher Gruppen des Hauses.

Der politische Mehrheitenwechsel im Land Berlin zu Anfang des Jahres hat das ZIB nicht unwesentlich berührt. Am Ende des Berichtsjahres besteht nun begründeter Optimismus, die noch anstehenden Probleme in vernünftiger, sachgerechter Weise zu lösen und dem ZIB eine Perspektive über viele Jahre zu geben.

Leider ist es auch in diesem Jahr wiederum nicht gelungen, die der Technischen Universität Berlin zugeordnete Stelle des Vizepräsidenten des ZIB zu besetzen. Hier richten sich die Hoffnungen auf einen glücklichen Abschluß der im Berichtszeitraum begonnenen Aktivitäten.



Prof. Dr. Peter Deuflhard

Präsident

2. Forschung und Entwicklung

Ermutigt durch die stürmische Entwicklung von Rechnern und Rechenmethoden in den letzten beiden Jahrzehnten, haben sich die mathematischen Modelle zur Beschreibung von physikalischen, chemischen, technischen oder biologischen Phänomenen und Prozessen derart verfeinert, daß sie heute für eine realistische Computersimulation prinzipiell taugen. Methoden zur tatsächlichen Simulation oder Optimierung dieser mathematischen Modelle werden in dem Gebiet *Scientific Computing* entwickelt. Dieses Gebiet im interdisziplinären Spannungsfeld von Mathematik, Ingenieurmathematik, Informatik und Naturwissenschaften ist erst in jüngster Zeit zusammengewachsen. Ziel des *Scientific Computing* ist es, die Komplexitätsgrenze lösbarer Probleme hinauszuschieben, also auch bisher verschlossene Bereiche der Natur- und Ingenieurwissenschaften einer rechnerischen Beherrschung zu öffnen. Es ist absehbar, daß *Scientific Computing* die Wettbewerbsfähigkeit in zahlreichen Zweigen der Industrie (Chemie, Elektronik, Robotik, Fahrzeugbau, Luft- und Raumfahrt etc.) beeinflussen wird sowie eine entscheidende Rolle bei wichtigen gesellschaftlichen Fragen (z. B. globale Klimamodelle, Krebstherapie, umweltverträgliche Schonung von Primärenergie) spielen wird.

2.1 Abteilungen

Der Bereich "Forschung und Entwicklung" gliedert sich in Abteilungen, in denen verschiedene Themenkreise des *Scientific Computing* behandelt werden.

Numerik

Aufgabe ist die Forschung und Entwicklung im Bereich der algorithmisch orientierten numerischen Mathematik. Die Arbeit konzentriert sich auf adaptive Multilevel-Algorithmen für gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen mit Schwerpunkt große und nichtlineare Systeme.

Symbolik

Aufgabe ist die Entwicklung von effektiven und anwendungsorientierten Algorithmen der symbolischen Mathematik. Schwerpunkte sind technische Expertensysteme, insbesondere vom gemischten symbolisch-numerischen Typ.

Numerische Software-Entwicklung

Aufgabe ist die Entwicklung von Anwenderprogrammen aus Forschungs-codes, welche am ZIB entstanden sind. Schwerpunkte sind effektive Implementierungen und anwenderfreundliche Systeme. Die Abteilung wurde Anfang 1989 gegründet.

Software-Information

Hier werden Sammlungen von ZIB-Programmen sowie von öffentlich zugänglicher mathematischer Software aus dem Gebiet Scientific Computing zur Verfügung gestellt. Die Abteilung betreut auch einen europäischen netlib-Knoten. Die Weitergabe der Information erfolgt vorwiegend über elektronische Medien (electronic library - eLib), aber auch über Drucksachen und Bänder. Die Abteilung besteht seit Anfang 1989.

Graphik

Im Berichtszeitraum wurde eine Umorganisation notwendig. Es wurde beschlossen, die Arbeit der Abteilung auf interne Dienstleistungen zu konzentrieren und zur Koordination eine Graphik-Kommission einzusetzen.

Systolik

In der Abteilung Systolik werden die Wechselwirkungen zwischen adaptiven parallelen Algorithmen und Rechnerarchitekturen untersucht. Betrachtet werden sowohl statische (auch systolische) als auch dynamisch rekonfigurierbare Architekturen.

Verteilte Systeme

Die Mitarbeiter der Abteilung Verteilte Systeme des ZIB waren im Berichtszeitraum weiterhin im Rahmen der Kooperation mit der GMD-FOKUS zur Mitarbeit in zwei BERKOM-Projekten abgeordnet. Diese Kooperation wurde bis Ende 1991 verlängert.

2.2 Projekte

Der eher statischen Abteilungsstruktur ist die flexiblere Projekt-Struktur überlagert. Im folgenden werden verschiedene Projekte einzeln dargestellt.

Adaptive Finite-Element-Methoden für partielle Differentialgleichungen

P. Deuffhard, R. Kornhuber, F. A. Bornemann, A. Walter, R. Roitzsch, O. Paetsch

Kooperation: H. Yserentant, P. Leinen (Univ. Dortmund), G. Wittum (Univ. Heidelberg),
R. Freund (RIACS, USA)

Trotz der umfangreichen weltweiten Anstrengungen, die sich mit der numerischen Lösung von partiellen Differentialgleichungen befassen, steckt eine wirklich effektive adaptive Lösung immer noch in den Kinderschuhen. Die Abteilung *Numerik* hat sich die Entwicklung von adaptiven Multilevel-Methoden, speziell in der Form von adaptiven Finite-Element-Methoden, als Schwerpunktthema gewählt.

Der Zugang über Multilevel-Methoden läßt hoffen, daß schließlich die miteinander verknüpften Probleme Gittergenerierung, lokale Schätzung von Diskretisierungsfehlern und schnelle iterative Lösung der auftretenden linearen und nichtlinearen hochdimensionalen Gleichungssysteme aus einer Hand befriedigend gelöst werden können. Im folgenden werden einige Subprojekte einzeln aufgeführt.

Adaptive Gittergenerierung für stationäre anisotrope Probleme in zwei Variablen:

Bei isotropen Problemen, wie sie etwa vom Laplace-Operator erzeugt werden, spielt die Richtung der Kanten der zur Diskretisierung verwendeten Triangulierung eine untergeordnete Rolle. Für diese Problemklasse wurden die Arbeiten an der C-Version des Programmpaketes KASKADE i. w. abgeschlossen. (TR 89-4, TR 89-5). Die in der Praxis auftretenden Probleme sind jedoch sehr oft anisotrop, da durch das Auftreten starker konvektiver Terme der Transport in bestimmte Richtungen dominiert. Beispiele bietet etwa die numerische Simulation von Verbrennungsprozessen im Falle hoher Geschwindigkeiten oder von Halbleiterbauelementen im Falle starker elektrischer Felder. Hier liegt der Ausgangspunkt zur Entwicklung einer problemangepaßten, anisotropen Verfeinerungsstrategie, welche durch adaptive Orientierung und gerichtete Verfeinerung dem Auftreten dominierender Richtungen Rechnung trägt. Dieser neue Ansatz führt bei erheblich geringerem Aufwand auf stabilere und genauere Näherungslösungen, wie sich aus den Bildern 1 und 2 ergibt.

Im Berichtsjahr wurden die bereits 1988 begonnenen Arbeiten zu einem gewissen Abschluß gebracht (Preprint SC 89-5) und durch Vorträge einer breiteren Öffentlichkeit vorgestellt. Lokal strukturierte Gitter, wie sie durch anisotrope Verfeinerung automatisch erzeugt werden, legen eine Reihe weiterer Anwendungen nahe. Neben konvektiv dominierten Problemen sollen daher im

folgenden Berichtsjahr auch freie Randwertprobleme sowie die Behandlung der auftretenden Gleichungssysteme unter diesen neuen Gesichtspunkten untersucht werden.

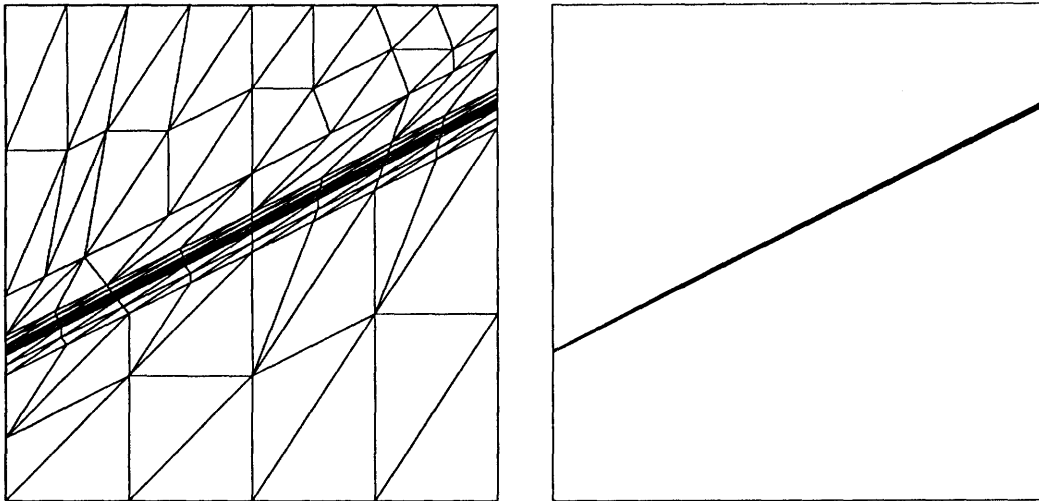


Bild 1: Anisotrope Triangulierung (118 Knoten) und Höhenlinien der zugehörigen Näherungslösung

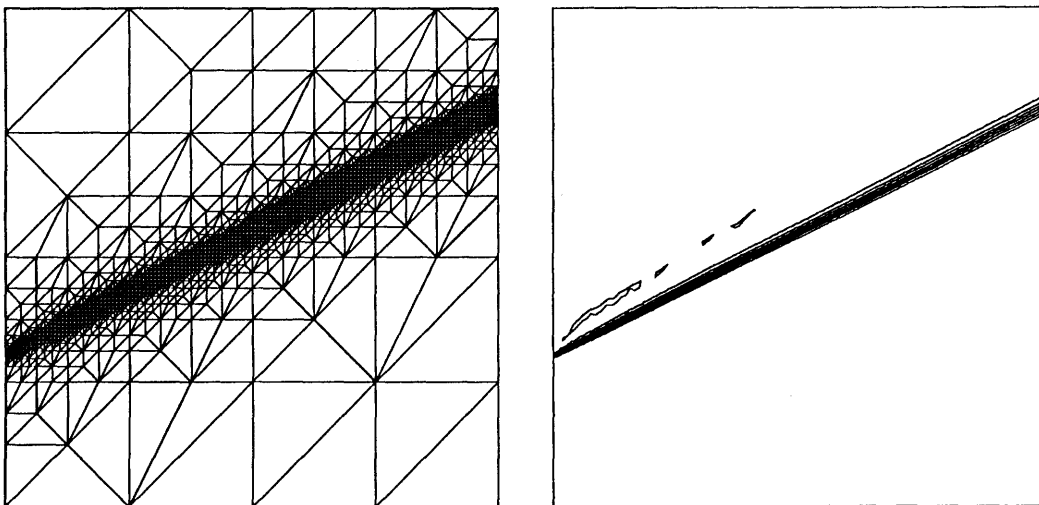


Bild 2: Isotrope Triangulierung (1462 Knoten) und Höhenlinien der zugehörigen Näherungslösung

Multilevel-Diskretisierung in Zeit und Ort: Zur Lösung parabolischer Evolutionsgleichungen wurde eine neuartige Multilevel-Technik entwickelt. Hauptidee ist es, die ausgezeichnete Rolle der Zeit, die den physikalischen Prozeß steuert, zur Steuerung der Lösung zu nutzen. Zeitabhängige Prozesse endlich vieler Zustandsgrößen werden durch gewöhnliche Differentialgleichungen beschrieben, für die bewährte Multilevel-Techniken zur Zeitschrittweiten- und Ordnungssteuerung u. a. am ZIB entwickelt worden sind. Parabolische Probleme besitzen aber unendlich viele Zustandsgrößen: je eine je Raumpunkt. Faßt man diese aber in einem sog. Hilbertraum zu einer gedanklichen Einheit zusammen, so besteht eine hinreichende Analogie zu gewöhnlichen Differentialgleichungen. Diese Analogie wurde theoretisch soweit vorangetrieben, daß bestehendes Know-how über gewöhnliche Differentialgleichungen zur Formulierung einer effektiven Zeitschrittweitensteuerung verwendet werden konnte. Zur Ausführung dieses Algorithmus muß rechnerisch noch die Zusammenfassung der Zustandsgrößen, mathematisch die Lösung von elliptischen Problemen, aufgelöst werden. Diese Zusammenfassung braucht nur durch endlich viele Größen in einer Unschärfe realisiert zu werden, die Störungen im Rahmen der vorgegebenen Genauigkeit produziert. Die zulässige Unschärfe wird von der Zeitsteuerung ermittelt und dem Lösungsalgorithmus für die elliptischen Sub-Probleme mitgeteilt. Dies macht die Verwendung adaptiver Multilevel-Verfahren mit Fehlerschätzung erforderlich, es empfiehlt sich die Verwendung von FEM-Algorithmen. Die algorithmische Implementierung des geschilderten Prozesses mit angepaßten Datenstrukturen führt zu hoher Effektivität. Durch die problemangepaßte Platzierung der Raumgittererzeugung unter die Zeitsteuerung sind die üblichen Probleme anderer Algorithmen, Gitter zeitlich zu verändern, nicht vorhanden. Implementiert und getestet wurde dieser an sich dimensionsunabhängige Entwurf für Probleme mit eindimensionalem Ortsteil (TR 89-7), wobei die Effektivität an Erfolg versprechenden Beispielen unter Beweis gestellt wurde.

Im Zusammenhang mit der neuen Vorkonditionierung von Bramble, Pasciak, Xu (siehe Yserentant (SC 89-9)) ist eine Version für zweidimensionalen Raumteil geplant. Diese soll Verwendung in einem gerade anlaufenden Projekt "Hyperthermie" in Kooperation mit dem Rudolf-Virchow-Krankenhaus (R. Felix, P. Wust, J. Nadobny) finden.

Iterationsverfahren für große Multilevel-Systeme: Für skalare elliptische Probleme in allgemeinen 2-D-Gebieten hat sich das konjugierte Gradienten-Verfahren (cg-Verfahren) mit *Vorkonditionierung* durch hierarchische Basen (Yserentant 1984) auch bei stark nichtuniformen Gittern bewährt. Für allgemeinere Problemklassen sind entsprechend effektive Iterationsverfahren weltweit noch in Entwicklung. Für skalare elliptische 3-D-Probleme wurde in jüngster Zeit eine spezielle Vorkonditionierung von Bramble / Pasciak / Xu vorgeschlagen. Sie wurde von Yserentant (Preprint SC 89-9) in wichtigen Details modifiziert und auf eine durchsichtigere Weise theoretisch begründet (Projektion auf L_2). In der nun vorliegenden Form eignet sie sich für zahlreiche relevante Problemklassen in 2-D und 3-D.

Für lineare *nichtelliptische* Probleme führt Diskretisierung i. a. auf sehr große lineare Gleichungssysteme mit nichtsymmetrischer Matrix. Für solche Systeme wurden kompakte effiziente Sekantenverfahren im Berichtszeitraum vorgeschlagen und in Zusammenarbeit mit R. Freund (RIACS, USA) entwickelt. Die Ergebnisse im Berichtszeitraum waren bereits äußerst ermutigend. Entsprechende Veröffentlichungen erscheinen erst 1990. Ein wichtiger Aspekt dieser Verfahren ist ihre Anwendbarkeit zur Lösung schwach nichtlinearer Probleme - d. h. nichtlinearer Probleme, bei denen "gute" Startdaten für die Iteration vorliegen.

Für allgemeine *große nichtlineare* Probleme wurden *globale inexakte Newton-Methoden* theoretisch neu durchleuchtet, was zu wichtigen Konsequenzen für die praktische Realisierung führt. Auch diese Resultate werden erst 1990 in Druck erscheinen und als Codes entwickelt.

Diskrete Galerkin-Methoden zur Lösung abzählbarer Systeme von Differentialgleichungen

M. Wulkow, P. Deuflhard

Kooperation: U. Budde (vormals TU Berlin, jetzt Schering AG), Mitarbeiter der Arbeitsgruppe Reichert (Technische Chemie, TU Berlin)

Abzählbare Systeme gewöhnlicher Differentialgleichungen (CODE's) entstehen z. B. bei der Modellierung chemischer Polymerisationsprozesse, bei der Modellierung von Rußbildung in Motoren, bei Mastergleichungen in Chemie, Biologie und Physik oder bei stochastischen Prozessen. Die numerische Lösung solcher unendlich dimensionaler Systeme ist von großem praktischen Interesse, doch schon bei einer evtl. möglichen Reduzierung auf endlich viele gewöhnliche (meist steife) Differentialgleichungen sind Größenordnungen von 10.000 bis 1.000.000 Gleichungen zu bewältigen.

Der 1988 entwickelte Ansatz zur Lösung solcher Probleme mittels diskreter Galerkin-Methoden konnte 1989 nicht nur verbessert, sondern auf praktische Probleme angewandt werden. Das abzählbare System wird dabei als gewöhnliche Differentialgleichung in einem bestimmten Folgenraum aufgefaßt, der so gewählt wird, daß das Problem einerseits in ihm eine Lösung besitzt und andererseits in diesem Raum eine effizienten Galerkin-Approximation der Lösung möglich ist. Dies führt zu gewichteten Folgenräumen, die von Orthogonalpolynomen einer diskreten Variablen aufgespannt werden.

In Zusammenarbeit mit einem Chemiker (U. Budde) konnte die Methode erfolgreich auf einen technisch relevanten Prozess angewendet werden (SC 89-7). Dabei wurde ein vollständiges System ohne zusätzliche chemische Annahmen in Rechenzeiten gelöst, die auch die Anwendung der Methode auf PC's ermöglichen werden.

Newton-Algorithmen für hoch-nichtlineare Probleme

P. Deuflhard, U. Nowak, L. Weimann

Im Berichtszeitraum wurde von P. Deuflhard an dem Buch "Newton Techniques for Highly Nonlinear Problems - Theory and Algorithms" weitergearbeitet. Das Buch behandelt i. w. die folgenden Themen:

1. Lokale Newton-Techniken für schwach-nichtlineare Probleme
 - 1.1 Lokale Newton-Methoden
 - 1.2 Lokale Gauss-Newton-Methoden
2. Globale Newton-Techniken für hoch-nichtlineare Probleme
 - 2.1 Globale Newton-Algorithmen
 - 2.2 Globale Gauss-Newton-Algorithmen
3. Globale Fortsetzungstechniken für parameterabhängige Systeme
 - 3.1 Numerische Pfadverfolgung bei fester Parametrisierung
 - 3.2 Numerische Pfadverfolgung bei impliziter Reparametrisierung
 - 3.3 Berechnung einfacher Verzweigungen
 - 3.4 Berechnung von Singularitäten höherer Ordnung
4. Newton-Techniken für nichtlineare gewöhnliche Differentialgleichungen
 - 4.1 Steife Integration von Anfangswertproblemen
 - 4.2 Schießverfahren bei zeitartigen Randwertproblemen
 - 4.3 Kollokationsverfahren bei raumartigen Randwertproblemen
5. Adaptive Newton-Multilevel-Methoden für partielle Differentialgleichungen

Die Kapitel 1 - 4 stehen im wesentlichen. Kapitel 5 wird derzeit ausgearbeitet. Darüberhinaus enthält jedes Kapitel illustrierende Beispiele und Übungsaufgaben. Forschungscode zu den einzelnen Kapiteln werden nach und nach auf Software-Qualitäts-Standard gebracht und sollen vom ZIB erhältlich sein (über die Sammlung CODELIB).

Im Berichtsjahr konnte die Implementierung der Codes zu den globalen Newton-Algorithmen i. w. abgeschlossen werden. Neben der Berücksichtigung neuester theoretischer Resultate wurde ein Programm-Interface entwickelt, das sowohl den "easy-to-use"-Aufruf als auch die Wahl spezieller algorithmischer Varianten gestattet. Die Arbeiten an einer ausführlichen Dokumentation mit Test- und Vergleichsläufen stehen kurz vor dem Abschluß.

Numerische Lösung freier Randwertprobleme

R. Hoppe, R. Kornhuber

Im Rahmen der Behandlung freier Randwertprobleme wurde vorrangig die numerische Simulation von Phasenwechselproblemen betrieben. Ein signifikantes Ergebnis war die Entwicklung und Implementation eines global konvergenten Mehrgitterverfahrens für Zwei-Phasen Stefan Probleme, das sich gegenüber bereits existenten lokal konvergenten Methoden durch wesentlich höhere Effizienzraten auszeichnet. Neben fortführenden Arbeiten auf dem Gebiet der elektromagnetischen Induktion in ferro-magnetischen Medien lag ein weiterer Anwendungsschwerpunkt in der Modellierung und Simulation von Wärme- und Massentransportphänomenen bei der Verfestigung mehrkomponentiger Materialien. In diesem Zusammenhang wurde ein spezielles Mehrgitterverfahren entwickelt, das die effizienten

numerische Berechnung von Temperaturverteilungen und Konzentrationsprofilen bei der Makrosegregation von Metallegierungen ermöglicht.

Extrapolationsmethoden für gewöhnliche Differentialgleichungen und differentiell-algebraische Systeme

U. Nowak, U. Pöhle, P. Deuflhard, F. A. Bornemann

Im Berichtszeitraum wurde das Skriptum "Numerik von Anfangswertmethoden für gewöhnliche Differentialgleichungen" fertiggestellt [TR 89-2]. Die für Extrapolationsverfahren relevanten neuen Erkenntnisse, wie etwa interne Skalierung und Schätzung der logarithmischen Norm, wurden in verschiedenste Extrapolationscodes implementiert und intensiv getestet. Die dabei verwendeten Testbibliotheken und Testrahmenprogramme mußten auf eine UNIX-Umgebung portiert werden.

Daneben wurde die Entwicklung eines Extrapolationsverfahrens für nichtlineare Systeme von parabolischen Anfangswertproblemen in einer Raumdimension weiter fortgeführt. Die algorithmischen Untersuchungen zur simultanen Fehler- und Schrittweitenkontrolle in Raum und Zeit, unter Verwendung von mitbewegten Gittern, sind i. w. abgeschlossen. Die Arbeiten an der Erstellung eines benutzerfreundlichen Programmpaketes wurden intensiviert und dürften bald zu einem gewissen Abschluß kommen.

Breiten Raum nahmen die Arbeiten an zwei großen Anwendungsprojekten ein. In Zusammenarbeit mit dem Zuse-Fellow J. Weyer, Universität Köln, wurde mit der numerischen Simulation epidemiologischer AIDS-Modelle begonnen. Die detaillierte Modellierung führt auf sehr große Systeme von steifen Differentialgleichungen. Durch die Entwicklung einer speziellen Sparse-Version des Extrapolationsverfahren EULSIM, die ein zusätzliches internes sparsing, d. h. Ausdünnen der Jacobimatrix, erlaubt, konnte der Bedarf an Rechenzeit und Speicherplatz pro Simulation drastisch gesenkt werden. Dies erlaubt nun die intensive Arbeit an der Überprüfung und Verbesserung der Modelle. Im zweiten großen Anwendungsprojekt wurde im Auftrag der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung eine Zeitschrittweitensteuerung in ein Programmpaket zur Simulation von Feuchte- und Wärmetransport in Baustoffen implementiert. Ohne die dort verwendeten Orts- und Zeitdiskretisierungen zu ändern, konnte mit Hilfe von Extrapolationstechniken eine auf interne Fehlerschätzungen basierende Zeitschrittweitensteuerung entwickelt werden (interner Bericht, Nov. 1989). Die Verwendung der Schrittweitensteuerung führte nicht nur zu deutlichen Effizienzsteigerungen bei der Simulation komplexer Modelle, sondern deckte auch Schwachstellen in der mathematischen Formulierung der Probleme und den verwendeten Diskretisierungen auf. Eine umfassendere, weitere Zusammenarbeit würde sich daher anbieten. Das Know-how des ZIB in den Bereichen freie Randwertprobleme sowie Orts- und Zeitdiskretisierung partieller Differentialgleichungen dafür bietet gute Voraussetzungen.

Numerisch-symbolische Berechnung dynamischer Systeme

P. Deuflhard, A. Hohmann, K. Gatermann

Kooperation: B. Fiedler (Univ. Heidelberg)

Im Berichtszeitraum wurde das Projekt mit neuen Mitarbeitern neu gestartet. Zunächst wurde das bekannte effektive Pfadverfolgungsprogramm ALCON in wichtigen Teilen verbessert und in C programmiert. Die Verbesserungen beziehen sich besonders auf hochdimensionale Probleme - eine Dokumentation der Vergleichsresultate erscheint erst 1990. Darüberhinaus wurden erste Anfänge zu einem gemischt numerisch-symbolischen Programmpaket geschaffen. Der bereits entwickelte symbolische Präprozessor eignet sich auch zum Einbau in andere Programme (wie etwa PITCON von Rheinboldt et al.). Für Singularitäten höherer Ordnung wurden erweiterte Systeme unter Einbeziehung topologischer Störungen dargestellt. Die symbolische Behandlung erlaubt hier einen leichteren Zugriff auf probleminhärente Symmetrien.

Symbolische Präprozessoren für numerische Algorithmen

K. Gatermann, H. Melenk

Mit Hilfe eines Präprozessors können Gleichungssysteme, die in einer einfachen problemnahen Sprache formuliert sind, automatisch in eine Form umgewandelt werden, welche für den Einsatz des jeweils vorgesehenen numerischen Lösers erforderlich ist. Dabei wird es einerseits dem sporadischen oder erprobenden Anwender erspart, die jeweiligen Formatvorschriften/ Programmiersprachen zu erlernen, andererseits können aber auch zusätzliche abgeleitete für den numerischen Lösungsvorgang wichtige Zusammenhänge, z.B. Jacobi-Matrizen, intern ermittelt werden.

Das Instrumentarium entstammt der Computer-Algebra, welche automatische symbolische Analysen und Umformungen der unterschiedlichsten Typen erlaubt. Als erster Schritt wurde im Berichtsjahr ein Präprozessor für die Programme PITCON (Rheinboldt et al.) und ALCON (Deuflhard et al.) erstellt, der auf REDUCE aufbaut und die vor allem in Enschede (Holland) unter H. v. Hulzen entwickelten Moduln zur Erzeugung (GENTRAN) und Optimierung (SCOPE) von numerischem Code verwendet. In beiden Fällen wird aus einem in mathematischer Notation eingegebenen Funktionsvektor eine Gruppe hoch optimierter FORTRAN-Programme erzeugt, die dann compiliert, mit dem Löser zusammengebunden und gestartet werden.

Symbolische Modellierung chemischer Reaktionssysteme

H. Melenk

Kooperation: J. Warnatz (Institut für Technische Verbrennung der Universität Stuttgart)

Bei der numerischen Simulation technischer Verbrennungsvorgänge zwecks Optimierung treten mit wachsender Verfeinerung der zu Grunde gelegten Modelle immer mehr mathematisch zu berücksichtigende Komponenten auf, so daß es zunehmend schwieriger wird, die Modellgleichungen fehlerfrei von Hand aufzustellen. Andererseits ist es mit symbolischen Methoden gut möglich, diesen Vorgang zu automatisieren.

Es wurde deshalb begonnen, ein Programmpaket für die automatische Erstellung chemischer Reaktionssysteme zu entwickeln und zunächst am Einsatzfall der motorischen Verbrennung zu erproben. Für die Formulierung des zu aktivierenden chemischen Wissens wurde ein Paradigma gewählt, welches die typischen zweidimensionalen Graphen der chemischen Moleküle direkt mit Hilfe von *Pattern-Matching* in Produktionsregeln verknüpft. Dadurch wird die Chemie in den Programmstrukturen auch graphisch sichtbar und nachvollziehbar.

Symbolische Lösung polynomialer Gleichungssysteme

H. Melenk, K. Gatermann

Kooperation: H. M. Möller (Fernuniversität Hagen)

Bei dem Einsatz des Buchberger-Algorithmus (Gröbner-Basen-Technik) für die Lösung von polynomialen Gleichungssystemen konnte in Fortführung der Arbeiten aus früheren Jahren der Horizont der Berechenbarkeit erneut verschoben werden. Neu ist in diesem Zusammenhang eine aktive Faktorisierung der Polynomideale, bei der im Gegensatz zu dem sonst üblichen passiven Ansatz das Auffinden von Faktoren nicht mehr dem Zufall überlassen wird. Gleichzeitig wird es damit möglich, dem Algorithmus noch mehr Wissen über die (z.B. physikalische) Struktur des zu lösenden Problems zugänglich zu machen. Es wurde auch begonnen, Symmetrien der Ideale direkt in die Gröbner-Rechnungen einzubeziehen, wodurch sich teilweise erhebliche Vereinfachungen erzielen lassen.

Das vom ZIB bereit gestellte Softwarepaket für die Gröbner-Rechnungen in der REDUCE-Netlib und die Publikation im IMPACT haben zu einem regen Interesse und zu mehreren Vortrags-einladungen geführt. Erwähnenswert ist hier auch, daß am FB20 der Technischen Universität Berlin einige offene Probleme der Robotik und daß einige komplizierte symmetrische Systeme der Astrophysik (Université de Liège) mit Hilfe des Gröbner-Paketes des ZIB gelöst werden konnten.

Parallele Algorithmen der Computer Algebra

W. Neun, H. Melenk

Die Arbeiten in diesem Projekt beschränkten sich wegen mangelnder Personalkapazität auf die Abstimmung eines europäischen Projektantrags gemeinsam mit Bath (England) und Grenoble (Frankreich).

Parallelisierung adaptiver numerischer Algorithmen

G. Maierhöfer, G. Skorobohatyj, M. Grammel, U. Nowak

Im Berichtszeitraum wurden die Arbeiten an einer parallelen Version des adaptiven numerischen Integrators zur Berechnung eines Integralwertes (Romber-Quadratur), t_TRAPEX, basierend auf Transputern und der Sprache OCCAM2 abgeschlossen. Ein Bericht wurde erstellt (TR 89-8) und die Ergebnisse auch auf der Transputer-Anwendertagung, TAT'89, in Aachen vorgetragen (SC 89-8).

Das im t_TRAPEX eingesetzte modifizierte Farming Modell, wurde überarbeitet und auf im Hause vorhandene numerische Gleichungslöser EULEX, EULSIM, (explizite, semi-implizite Euler-Diskretisierung) übertragen. Es erfolgte die Implementierung t-EULSIM, t-EULEX auf Transputern in OCCAM2 (Hostsystem SUN). Ein Bericht ist in Druck. Mit Industrievertretern (MAN) wurde der Einsatz von t-EULSIM für Rad-Schiene-Systeme diskutiert und Voruntersuchungen zur Transliteratur der Implementierung von t-EULSIM in 3L-Fortran auf Transputern in einem PC-Hostsystem vorgenommen.

Die Arbeiten an POOL-TRAPEX, einer Implementierung des TRAPEX mit Hilfe einer objektorientierten Sprache, wurden abgeschlossen. Derartige Sprachen sind auch für adaptive numerische Anwendungen geeignet, wenn eine leistungsfähige Floating-Point Arithmetik Bestandteil der Sprache ist. Ein Bericht wird derzeit erstellt.

Museumsdokumentation

C. Saro-Lüdecke

Kooperation: Staatliche Museen Preußischer Kulturbesitz

Die Portierung des speziell für den Museumsbedarf von der MDA (British Museums Documentation Association) entwickelten Systems GOS auf kompatible Personal Computer wurde im Berichtsjahr erfolgreich abgeschlossen. Gleichzeitig wurde GOS dabei grundlegend erneuert:

- Trägersprache ist jetzt ANSI-C (ursprünglich: BCPL),
- es wurden Techniken für den indizierten Datenzugriff integriert,
- für die Anwenderschnittstelle werden standardisierte Fenster mit Menü-Technik verwendet.

Damit steht ein zeitgemäßes und wirksames Hilfsmittel zur Verfügung, das in seiner Flexibilität den meisten Konkurrenzprodukten technisch überlegen ist.

Für den Piloteinsatz wurden bereits mehrere Kopien von PC-GOS weitergegeben, u.a. auch an die MDA. Nach der Öffnung der Grenzen der DDR wurde auch bereits von Fachleuten aus der DDR Interesse an PC-GOS geäußert.

Europäische Normung von LISP

W. Neun

Auf Grund der Erfahrung in Sachen LISP-Implementierung wurde das ZIB eingeladen, an der Normung der Programmiersprache LISP mitzuarbeiten. Träger dieser Aktivität ist die europäische Gemeinschaft, und beteiligt sind zahlreiche europäische Institute und Firmen. Ziel ist die Definition eines Standards EULISP, der sich gegenüber dem amerikanischen Standard Common LISP durch ein schlankeres Design und eine bessere Modularisierung absetzt. Die EULISP-Gruppe steht in permanentem Kontakt über electronic Mail und trifft sich sporadisch zu Arbeitssitzungen.

Implementierung und Vertrieb von REDUCE / PSL

W. Neun, H. Melenk

Kooperation: A.C. Hearn (The RAND Corporation)

Robert Kessler (University of Utah)

E. Schrifer (GMD Bonn)

Förderung durch Cray Research, Inc. und Digital Equipment GmbH

Die Mitwirkung bei Implementierung und Weiterentwicklung des Computer Algebra Systems REDUCE durch das ZIB und seine Vorgängereinrichtung hat inzwischen eine langjährige Tradition. War es in den vergangenen Jahren vor allem die am ZIB entwickelte REDUCE-Version für die Cray-Rechner (deren Verarbeitungsleistung nach wie vor die weltweite Spitzenstellung hält), die das ZIB in Fachkreisen bekannt gemacht hatte, so kamen in diesem Jahr neue Versionen für Workstation-Prozessoren hinzu, die wieder neue Leistungsmaßstäbe setzen. So gelang es, durch konsequente Ausnutzung der Architektur moderner RISC-Prozessoren (z. Z. SPARC und MIPS) auf "normalen" Workstations Verarbeitungsleistungen für REDUCE zu

ermöglichen, die sonst größten Universalrechnern vorbehalten sind. Diese Aktivitäten wurden auch von Rechner-Herstellern unterstützt, die sich davon auch eine Verbesserung ihrer Marktchancen versprechen.

Nach Abschluß eines Lizenzvertrages mit der University of Utah über die Weitergabe von Portable Standard LISP (PSL) und Abstimmung mit Dr. A. C. Hearn wurde dann im 3. Quartal das Vertriebsspektrum des ZIB wesentlich erweitert: Zusätzlich zu den Rechnern Cray 1, X-MP, Y-MP, Cray 2 wurden jetzt PSL und REDUCE weltweit angeboten für:

SUN 3, 4, 386i, SPARC-Station,
DEC-Station 2100, 3100,
Silicon Graphics IRIS,
AT 386 und kompatibel unter UNIX,

so daß nun die wichtigsten Workstations der oberen Leistungsklasse bedient werden können.

Elektronische Softwarebibliothek eLib

J. Lügger, W. Dalitz, B. Kirkorowicz, S. Madlung

Kooperation: E. Grosse, AT&T Bell Labs in New Jersey, USA

Fachgruppe "Numerische Software" von GAMM, GI und DMV

Im März 1989 wurde die Abteilung "Softwareinformation" konstituiert - sie arbeitet an der Entwicklung einer "elektronischen Software Library - eLib" für mathematische Algorithmen aus allen Bereichen des "Scientific Computing". In erster Linie sollen gesammelt und elektronisch - über Netze - weitergegeben werden:

Algorithmen und Anwenderprogramme in FORTRAN, C etc. zusammen mit ihren Testprogrammen, Testdaten und ihrer Dokumentation. Vorwiegend soll es sich dabei um neuere Forschungscodes handeln, die dem "State of the Art" entsprechen. Thematisch sollen nicht nur numerische Codes gesammelt werden, sondern z.B. auch Verfahren aus der Computeralgebra.

Abstracts und Referenzen zu den Codes sowie Hinweise auf verwandte Themenbereiche. Benutzer der eLib sollen außerdem Gelegenheit dazu erhalten, ihre eigenen Anwender-Erfahrungen, Tests und Validierungen ebenfalls miteinzubringen. Testergebnisse zu den bereitgestellten Verfahren sind auch in grafischer Form, z.B. als PostScript Dateien, willkommen.

Vertriebsbedingungen und Gebühreninformationen, Profile von beteiligten Instituten und Organisationen sowie Kontaktadressen von Herstellern und Entwicklern der Software.

In einer ersten Ausbaustufe der eLib werden- seit Jahresende 89 - die folgenden technischen Bestandteile der eLib angeboten: ein on-Line Dienst mit nach dem GAMS-Index klassifizierter Software, ein off-Line Dienst für eLib-Anfragen per e-Mail, eine e-Mail Ausgabe im Rahmen des on-Line Dienstes sowie ein Fernkopier-Dienst für Algorithmen aus den USA. Konkret ist hier in Zusammenarbeit mit E. Grosse ein europäischer netlib-Knoten realisiert worden. Die eLib soll am 1. April 1990 zur allgemeinen Benutzung freigegeben werden. Vorerst gibt das ZIB auf dem Wege über die eLib eigene Software - u.a. die CODELIB - und Informationen dazu weiter.

Graphik-Software

O. Paetsch, J. Langendorf, H. Jaedicke

Die Arbeiten an und um GRAZIL, einem Programmpaket zur 2D- und 3D-Darstellung von Kurven und Funktionsverläufen, wurde intensiv fortgeführt. So wurden z.B. die Darstellungsmöglichkeiten im 3D-Bereich wesentlich erweitert. Durch die Entwicklung eines graphischen Editors für SUN-Workstations besteht nun die Möglichkeit der einfachen Nachbearbeitung der erzeugten Bilder. Um eine graphische Ausgabe auch aus einem laufenden Anwenderprogramm zu gestatten, wurde für eine UNIX-Umgebung eine Prozesskommunikation über Sockets realisiert, die es erlaubt, ein Anwendungsprogramm gleichzeitig mit GRAZIL laufen zu lassen, wobei das Anwendungsprogramm Daten zur graphischen Darstellung an GRAZIL sendet, welche dort sofort gezeigt werden können. Da diese Prozesskommunikation auch netzfähig ist, können Anwendungsprogramm und GRAZIL auch auf verschiedenen Rechnern (z.B. CRAY und SUN-Workstation) laufen.

Neben diesen Aktivitäten wurde auch die Möglichkeit der Video-Erzeugung untersucht. Mit freundlicher Unterstützung der Projektgruppe Art+Com wurde ein beispielhafter Videofilm produziert. Auf Grund der mäßigen Qualität des Endproduktes im VHS-Format wird dieser Weg zur Zeit nicht weiterverfolgt.

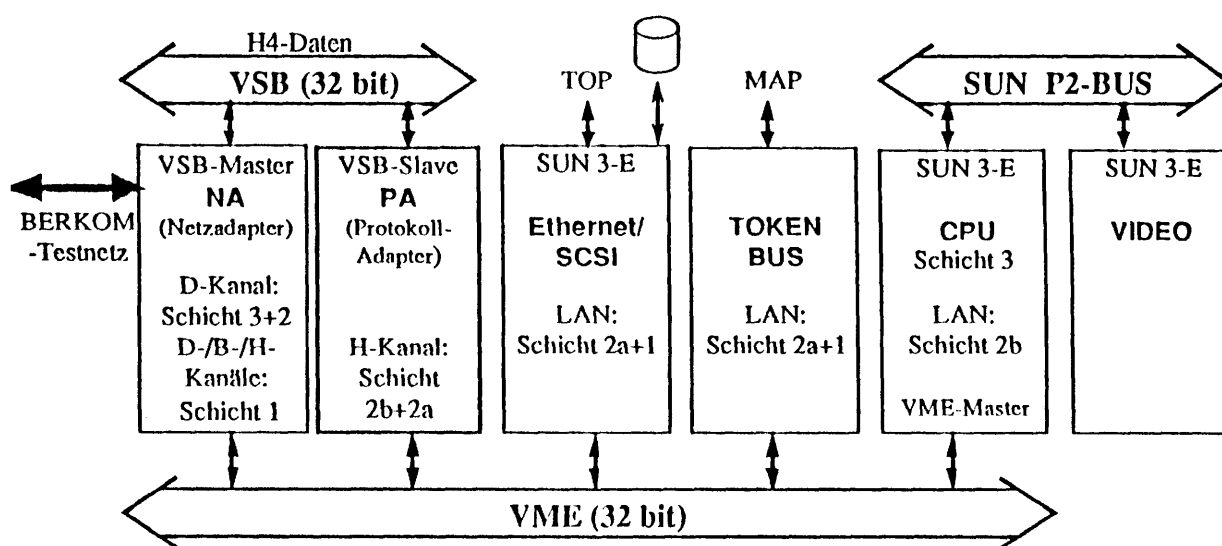
BERGATE

(Pilotentwicklung eines modularen Transitsystems zur Kopplung von LANs
ISO 8802/3 und ISO 8802/4 für das BERKOM-Testnetz)

C. Dölter, A. Gavras, K. Jacobsen, M. Vogelsänger

Kooperation: GMD-FOKUS

Im Berichtszeitraum wurde innerhalb des Projektes BERGATE ein Transitsystem (BTS) zur Kopplung von MAP- und TOP-LANs über das BERKOM-Testnetz (B-ISDN) entwickelt, dessen Grobstruktur in der Abbildung dargestellt ist.



Der Anschluß des BTS an das BERKOM-Testnetz erfolgt über einen Netzadapter (NA), der die Schicht 1-Funktion realisiert und für die Anpassung der seriellen R4B-Koaxialschnittstelle an die VSBbus-Schnittstelle sorgt (der NA ist eine Entwicklung im Rahmen des Projektes BERKOM). Die D-Kanal Protokollabwicklung geschieht auf der NA-Karte. Da sich der Netzadapter der beiden Bussysteme VME und VSB bedient, bot sich der Einsatz von SUN3/E-Rechnern an. Wegen der Geschwindigkeitsanforderungen des H4-Kanals (~140 MBit/s) dient der VSBbus ausschließlich dem Schicht 1/2-Daten- und Kontrollinformationsaustausch des Software-Treibersystems auf der CPU-Karte mit dem Protokolladapter (PA) oder LAN-Adaptern (Ethernet und Token Bus) erfolgt über den VMEbus.

Die Funktionalität des Protokolladapters umfaßt die Realisierung von MAC und LLC Funktionen sowie die Bedienung der beiden Busschnittstellen. Die 32-bit Struktur des PA an seinen Busschnittstellen ermöglicht die optimale Ausnutzung der VSB- und VME-Systeme, so daß z.B. die reale Übertragungsrate zwischen PA und NA über den VSBbus bei 320 Mbit/s liegt.

Der Anschluß von Token Bus LANs an das BTS erfolgt durch den Einsatz der Token Bus Controller Karte MVME372 und des dazugehörigen Breitbandmodems MVME371 von Motorola.

Die Controller Karte erlaubt die Abarbeitung aller 7-Schichten des ISO Referenz-Modells. Für das BTS war es allerdings erforderlich die Schichten 2b bis 7 auszublenden. Die Schichten 2b und 3 werden von der Host-CPU ausgeführt, die übrigen werden im Gateway (Kopplung in der Schicht 3) nicht unterstützt. Die Kommunikation mit dem Host über den VMEbus erfolgt mit Hilfe des Common Environment Softwaresystems.

Zusammenfassung der im Berichtszeitraum schwerpunktmäßig durchgeführten Arbeiten:

- Erarbeitung und Erstellung einer Systemspezifikation
- logischer Entwurf des Protokolladapters
- Schaltungseingabe und -simulation der logischen Komponenten des Protokolladapters
- Aufbereitung der Schaltung und Simulation des gesamten Protokolladapters
- physikalischer Entwurf der Protokolladapterkarte
- Unterlagenerstellung zur Produktion von PA-Prototypen
- Integration des Token Bus LAN-Adapters in das BTS
- Mitarbeit im BERKOM-Arbeitskreis 'Referenzmodell 1'

Multimedia-Dokumente im ISDN-B (MMD)

K.-D. Engel

Kooperation: GMD-FOKUS

Das ISO/OSI-7-Schichten-Referenzmodell ist gut geeignet zur Modellierung von Kommunikationsbeziehungen (1:1-Kommunikation), jedoch für die allgemeine Modellierung verteilter Anwendungen unzureichend. Hier müssen neue Modellierungsmethoden gefunden und international genormt werden. Da diese Methoden auch für dieses BERKOM-Projekt relevant sind, wurden vom MMD-Projekt Aktivitäten in der ISO und der CCITT angeregt und unterstützt. Im Rahmen der CCITT laufen diese Aktivitäten unter dem Titel *Distributed Application Framework* (DAF) und bei der ISO unter *Open Distributed Processing* (ODP). Diese Arbeiten wurden im Rahmen von BERKOM-Workshops und Arbeitsgruppen vorgestellt.

Integrierte, allgemeingültige Lösungen sind nur mit den Ergebnissen von ODP und DAF erreichbar. Sie kommen jedoch für BERKOM zu spät. Dasselbe gilt für Erweiterungen existierender Standards. Sie werden im Rahmen des MMD-Projektes angestoßen und beeinflusst.

Unter diesem Gesichtspunkt wurde der Projektinhalt modifiziert und gleichzeitig die Laufzeit des Projektes bis Ende 1991 verlängert.

Schwerpunkt ist nunmehr die Erstellung eines Referenzmodells im BERKOM-Rahmen. Hierzu werden ausgehend von existierenden Normen Kombinationsmöglichkeiten und Erweiterungsnotwendigkeiten untersucht und in Form von BERKOM-Profilen festgeschrieben. Dieses werden dann nicht allgemeingültige, sondern kurzfristige BERKOM-spezifische Lösungen sein. Eine erste Version des neuen BERKOM-Referenzmodells wurde erstellt.

3. Anlagenbetrieb

3.1 Übersicht

Der Bereich Anlagenbetrieb des ZIB ist als Rechenzentrum für die Planung und den Betrieb aller Rechenanlagen des ZIB zuständig. Die Aufgaben des Bereichs wurden im wesentlichen drei Arbeitsgebieten zugeordnet und jeweils einer Abteilung übertragen:

- Ausbau und Betrieb eines Superrechners als hauptsächlich nach außen gerichtetes Dienstleistungsangebot des ZIB im Norddeutschen Vektorrechnerverbund (NVV)
- Interne Versorgung des ZIB mit Arbeitsmitteln der Datenverarbeitung
- Bedienung und Pflege der Maschinen

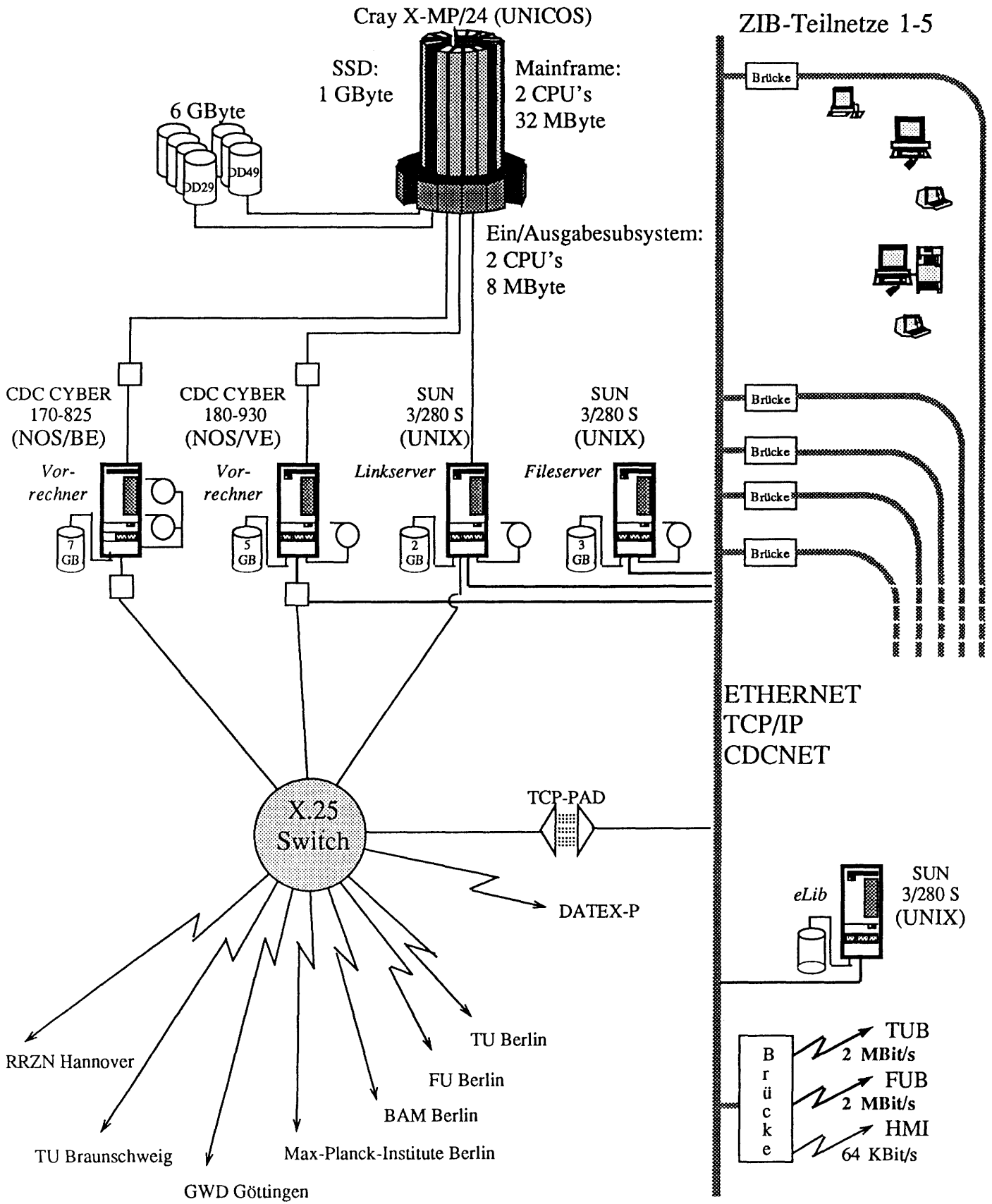
Im Rahmen dieser Arbeitsfelder beteiligt sich der Bereich Anlagenbetrieb auch an Entwicklungs- und Forschungsprojekten, über die an anderer Stelle berichtet wird.

Der im ZIB installierte Vektorrechner CRAY X-MP/24 dient im Verbund mit den Vektorrechnern in Kiel und in Hannover (letzterer ab 2. Quartal 1990) der Versorgung der Universitäten und wissenschaftlichen Einrichtungen in Berlin, Schleswig-Holstein und Niedersachsen mit Höchstleistungsrechnerkapazität.

Das Konzept, ein Verbundnetz von Rechnern unterschiedlicher Hersteller, Leistungsklassen und Architekturen zu schaffen, in dem Anwendungen auf unterschiedlichste Geräte so verteilt werden können, daß kurze Bearbeitungszeiten, lokale graphische Ausgaben und sonstige Arbeitserleichterungen für Benutzer in besonders wirtschaftlicher Weise realisiert werden, wurde in Berlin bereits 1979 als Leitlinie für die EDV-Planung akzeptiert (Der Senator für Wissenschaft und Forschung: Bericht der DV-Strukturkommission, Berlin 1979). Vor dem Hintergrund dieser Zielvorstellung entstanden die heterogenen Rechnernetze auf der Basis internationaler Standards (ISO/OSI), die bereits seit den frühen achtziger Jahren den Berliner Höchstleistungsrechner einer räumlich weitverteilten Benutzerschaft erschlossen.

Der Berliner Vektorrechner wurde bis zum Frühjahr 1989 unter dem Betriebssystem COS (CRAY Operating System) genutzt, das eine gute Ergänzung der bei den Berliner Universitäten und im niedersächsischen Raum verbreiteten Control Data Systeme war. Die Vernetzung mit den benutzenden Einrichtungen erfolgte mit Hilfe der sogenannten CRAY Station Software über Vorrechner verschiedener Hersteller, die unter den bei den Benutzern weitverbreiteten Betriebssystemen MVS (IBM), NOS/BE (CDC) und NOS/VE (CDC) betrieben wurden.

Rechnerkonfiguration des ZIB



Stand: 31. 12. 1989

Seit einigen Jahren ist auf dem Gebiet der Betriebssysteme für wissenschaftliche Anwendungen glücklicherweise eine starke Tendenz zur Vereinheitlichung in Richtung des für Rechner unterschiedlichster Hersteller erhältlichen Betriebssystems UNIX zu beobachten, die es nahelegte, mit dem Berliner Vektorrechner eine Vorreiterrolle bei der Einführung von UNIX zu übernehmen: Am 28. März 1989 wurde der Betrieb unter COS beendet und nach sorgfältiger Vorbereitung das Betriebssystem UNICOS, eine UNIX-Erweiterung der CRAY Research Inc., eingeführt. Auch in vielen anderen wissenschaftlichen Einrichtungen machte der Aufbau von Netzwerken mit UNIX-Arbeitsplatzrechnern im Laufe des Jahres 1989 so gute Fortschritte, daß am Ende des Jahres konkrete Projekte für die Verteilung von Anwendungen im Netz in Zusammenarbeit mit besonders interessierten Benutzern in Angriff genommen werden konnten. Die Konfigurationsskizze (Abbildung 1) zeigt den Stand der Konfiguration am Ende des Berichtsjahres.

Ein Vergleich mit unserem vorigen Jahresbericht zeigt dem interessierten Leser, daß der MVS-Vorrechner des Vektorrechners im Laufe des Jahres 1989 außer Betrieb genommen wurde. Diese im Zusammenhang mit der neu geschaffenen UNIX-Arbeitsumgebung unmittelbar einleuchtende betriebliche Vereinfachung hatte weitreichende Konsequenzen: Die Berliner wissenschaftlichen Einrichtungen mußten einen neuen Zentralknoten für das Rechnernetz EARN finden, und das ZIB mußte Ersatz für EARN als Zugangsmöglichkeit zum Vektorrechner aus der "SNA-Welt" schaffen und die bis dahin für SUN-Computer praktisch unerprobten X.400-Dienste als offizielles Produktionsmittel für electronic mail einsetzen. Während die Schwierigkeiten mit der speziellen Implementierung dieser Dienste auf SUN-Computern im Berichtszeitraum überwunden werden konnten, blieb die geringe Leistungsfähigkeit und Unzuverlässigkeit der vom Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V. (DFN) eingesetzten Gatewayrechner zu anderen internationalen Netzen ein schwerwiegendes und bislang ungelöstes Problem, das das ZIB in der täglichen Arbeit nicht unerheblich behindert hat.

Eine erhebliche Verbesserung der Leistungsfähigkeit und Funktionalität stellen die rechts unten in der Konfigurationsskizze angedeuteten Hochgeschwindigkeitsverbindungen (2 MBit/Sek) zu den Berliner Universitäten dar. Sie bieten gegenüber dem Stand vom Jahresanfang ein Mehrfaches der Datenübertragungsleistung. Die früher beobachteten Engpässe beim Übertragen der Rechenergebnisse zu den Benutzern sind damit zumindest für alle diejenigen Benutzer nicht mehr beobachtet worden, die einen entsprechend leistungsfähigen Zugang zu den lokalen Netzen der Universitäten haben. Auch die Übertragungsleistung von 2 MBit/Sekunde entspricht allerdings noch nicht den Ansprüchen eines fortschrittlichen Superrechnerbetriebes: Die on-line Visualisierung von Simulationsläufen erfordert Datenraten von mehr als 100 MBit/Sekunde. Die Schaffung derartiger Verbindungen erfordert nicht nur den Erwerb zusätzlicher Rechnernetzkomponenten, sondern auch Investitionen im Bereich der Deutschen Bundespost, die erst dann sinnvoll geplant werden können, wenn der künftige neue Standort des ZIB feststeht.

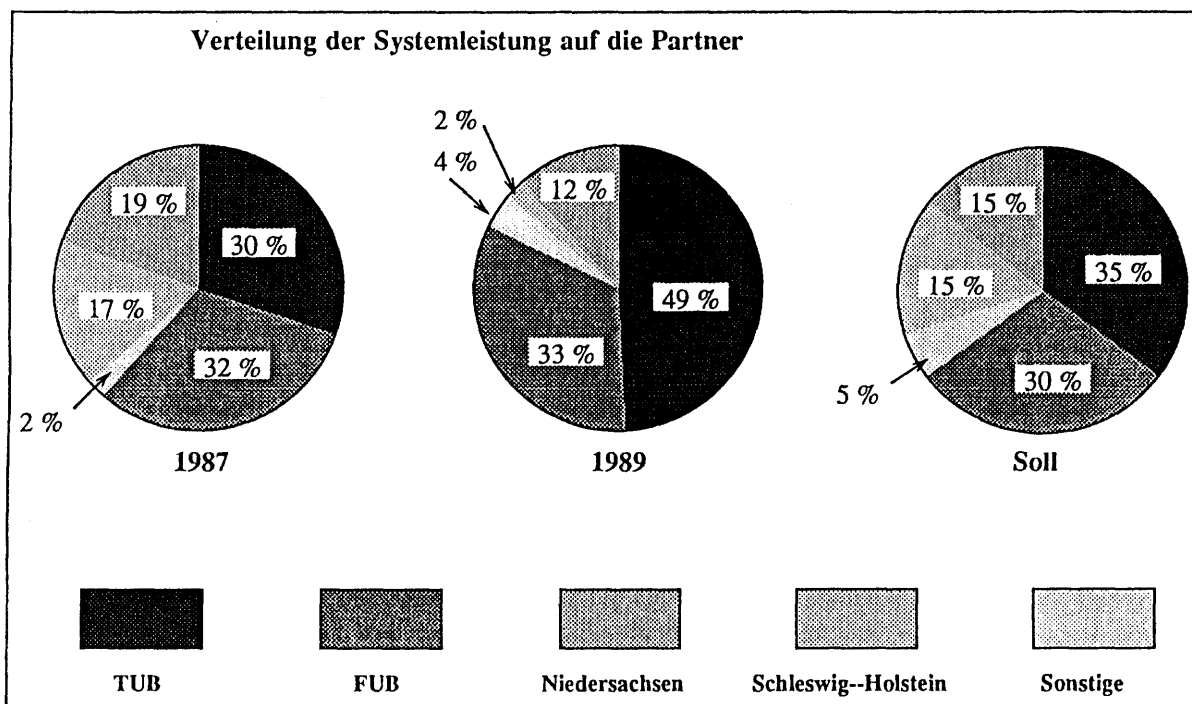
Betrachtet man die in den folgenden Abschnitten genauer beschriebene Nutzung des Vektorrechners vom Standpunkt des Datenverarbeitungstechnikers, so wird offenbar, daß das Anwendungsspektrum lediglich solche Anwendungen umfaßt, die keine großen Datenmengen erzeugen bzw. benötigen. Simulationsläufe, die Modelldaten im Umfang von einigen Gigabyte erzeugen, wie sie für Rechner dieser Leistungsklasse typisch sind, können im ZIB nicht durchgeführt werden, weil für solche Anwendungen keine Datenspeicherung möglich ist. Da auch die vorgesehene Verbesserung der Rechnernetze nicht ausreichen wird, um wirklich große Datenmengen zu wirtschaftlich vertretbaren Bedingungen direkt zu den Endverbrauchern zu

bringen, wurde im Laufe des Berichtsjahres eine interne Studie über Fileserver erstellt, die die Beschaffung eines geeigneten Archivspeichers vorbereiten soll. Die Ergebnisse dieser Studie werden in den Auswahl- und Beschaffungsprozeß des Nachfolgesystems für den Höchstleistungsrechner des ZIB eingebracht werden.

3.2 Nutzung der CRAY X-MP/24

3.2.1 Verteilung der Gesamtleistung auf die Partner

Während bis zur Installation des zum Norddeutschen Vektorrechnerverbund gehörenden Supercomputers in Kiel (Dezember 1987) die Verteilung der Rechenzeiten auf dem Berliner Supercomputer recht genau dem vertraglich festgelegten Schlüssel entsprach, ließ bereits 1988 die Nutzung des Berliner Rechners durch Benutzer aus Schleswig-Holstein nach.



Diese Tendenz setzte sich auch 1989 fort. Das entspricht einerseits den ursprünglichen Intentionen des Norddeutschen Vektorrechnerverbundes (Ausgleich von Investitionen), andererseits liegt es daran, daß manche Anwendungen, die im Hinblick auf die mit einem größeren Hauptspeicher versehene Kieler Anlage konzipiert wurden, auf dem kleineren Berliner Rechner nicht bearbeitet werden können. Es ist zu erwarten, daß 1990 auch der niedersächsische Anteil am Berliner Rechner erheblich kleiner werden wird. Berlin hat sein Kontingent auf dem Schleswig-Holsteiner Supercomputer auch 1989 näherungsweise erschöpft.

3.2.2 Systemauslastung, Vergleich COS - UNICOS

Superrechner sind in vielen Forschungsdisziplinen das einzige Werkzeug der Forschung, in anderen Disziplinen sind sie ein unentbehrliches Hilfsmittel neben anderen Geräten. Der Bedarf an Rechenleistung übersteigt die technischen Möglichkeiten dermaßen, daß viele Projekte nicht in Angriff genommen werden, weil die verfügbare Rechenleistung viel zu gering ist. Dies erklärt die Beobachtung, daß Höchstleistungsrechner immer voll ausgelastet sind, und daß lange Wartezeiten für die Bearbeitung größerer Aufträge bestehen. Ein Ende dieser Entwicklung ist nicht absehbar. Ein Wechsel des Betriebssystems muß in dieser systematischen Mangelsituation daher sorgfältig unter dem Gesichtspunkt möglicher Leistungsgewinne oder -verluste bedacht werden.

In der Zeit vom 1. Januar bis zum 26. März 1989 (Ende des COS-Betriebes) wurden 3.351,8 CPU-Stunden an Benutzer abgegeben. Rechnet man diese Leistung auf das ganze Jahr hoch, so erhält man 14.393 CPU-Stunden. Dies ist die übliche Leistung eines voll ausgelasteten Systems mit gut eingestellten Betriebsparametern. (Leistungsabgabe 1988: 14.589 CPU-Stunden).

Unter UNICOS wurden in den restlichen 280 Tagen des Jahres 11.009,1 Stunden CPU-Zeit abgegeben. Das entspricht hochgerechnet 14.351 CPU-Stunden im Jahr. Diese scheinbar gleich gebliebene Effektivität ist an sich schon als gutes Ergebnis anzusehen, da UNICOS als neues und sehr mächtiges Betriebssystem zunächst unter dem "Verdacht" stand, die höhere Funktionalität mit einem schlechteren Gesamtdurchsatz zu erkaufen. Betrachtet man aber die CPU-Abgabe in den einzelnen Monaten des Jahres, so kann man allerdings beobachten, daß die abgegebene CPU-Zeit gegen Jahresende pro Monat eine steigende Tendenz hat:

Tabelle 1: Gesamtnutzung der CRAY X-MP/24 (CPU-Zeit in Stunden)

a) Nutzung unter COS:

	abgegebene CPU-Zeit	Prozent der Kalenderzeit
Januar	1.241,4	167
Februar	1.111,7	165
März	998,7	160

b) Nutzung unter UNICOS

März	131,9	110
April	1.015,6	141
Mai	1.129,6	152
Juni	1.126,6	156
Juli	1.228,7	165
August	1.258,7	169
September	1.215,5	169
Oktober	1.197,3	161
November	1.307,2	182
Dezember	1.398,0	188

Da die CRAY X-MP/24 zwei Rechenprozessoren hat, kann die CPU-Zeit 200 % der Betriebszeit nicht übersteigen. Der zeitliche Verlauf der Leistungsabgabe kann durch verschiedene Param

beeinflusst sein, die hier nicht im einzelnen analysiert werden sollen (besseres Verständnis der Systemparameter, bessere SSD-Integration, andere Benutzerprogramme). Die abgegebene Leistung in den Monaten November und Dezember zeigt aber auch, daß unter UNICOS eine hervorragende Systemausnutzung erreicht werden kann.

3.2.3 Fachbereiche mit großem Rechenzeitverbrauch

In der folgenden Zusammenstellung sind diejenigen Fachbereiche der Berliner Hochschulen aufgeführt, die 1989 unter UNICOS (also nach dem 26. März) mehr als 100 Stunden CPU-Zeit der CRAY X-MP/24 verbraucht haben. Es werden nicht die einzelnen Projekte erwähnt, sondern lediglich einige Stichworte aus den Projektbeschreibungen, die einen Eindruck von der Art der Anwendungen vermitteln. Aus den Partnerländern werden Einzelprojekte, die in demselben Zeitraum mehr als 100 Stunden CPU-Zeit verbraucht haben, zusammengestellt. Die Systemzeit, deren Verhältnis zur CPU-Zeit ein gutes Maß für die Ausnutzung sämtlicher Betriebsmittel des Supercomputers (CPU, Hauptspeicher, Ein/Ausgabe) gibt, wird ebenfalls aufgeführt. Sie ist sehr gut geeignet für den Vergleich von Leistungen (Definition von Anteilen etc.), ist aber kein absolutes Maß, weil sie vom Betreiber des Rechners individuell für die jeweilige Maschine definiert wird.

Tabelle 2: Verteilung der Rechenzeit nach Großverbrauchern

	CPU-Zeit (Stunden)	System-Zeit (Stunden)
Freie Universität Berlin		
Fachbereich 20, Physik	1399	595
- Molekülorbital-Berechnungen an großen organischen Systemen		
- Eichtheorie auf topologisch nichttrivialen Gittern		
- Computerunterstützte Untersuchungen zur Hochenergiephysik		
- Phasenübergang an Flüssigkristallen		
Fachbereich 21, Chemie	543	255
- Quantenchemische Rechnungen an großen organischen Molekülen		
- Quantenchemische Berechnungen der elektronischen Struktur von Molekülen und Clustern		
- Quantenchemische Berechnungen photophysikalischer Prozesse		
- Molekulardynamik von Clustern		

Fachbereich 24, Geowissenschaften	1280	614
- Numerische Simulation zur Klimaforschung		
- Entwicklung und Anpassung des TADAP Modells		
- Grund- und Bodenwassermodelle		
 <i>Technische Universität Berlin</i>		
Fachbereich 3, Mathematik	170	69
- Numerische Behandlung partieller Differentialgleichungen		
- Numerische Behandlung von Hamilton-Jacobi-Baumann-Gleichungen		
Fachbereich 4, Physik	1105	461
- Ab initio Berechnung von Kräften in Kristallen		
- Ab initio Rechnungen v. Störstellen in Gallium Arsenid		
- Synthetische Spektren magnetischer weißer Zwerge		
- Staubbildung in pulsierenden Sternatmosphären		
- Strahlungstransport in sphärischen Staubhüllen um späte Riesen		
Fachbereich 5, Synthetische und Analytische Chemie	839	418
- Quantenmechanische Berechnungen unkonventioneller Gasphasenspezies		
- Quantentheoretische Molekülberechnungen (Ionenchemie: PTICR)		
- Röntgenstrukturanalysen von Übergangsmetallkomplexen		
Fachbereich 6, Physikalische und Angewandte Chemie	1229	500
- Molekulardynamische Rechnungen (Brownsche Dynamik)		
- Bestimmung des zweiten Virialkoeffizienten von Molekülmodellen im kontinuierlichen Raum		
- Bestimmung des zweiten osmotischen Virialkoeffizienten von sternförmigen Polymermolekülen		
- Gleichzeitige ab initio Behandlung iso-elektronischer zweiatomiger Moleküle		
- Molekulardynamische Rechnungen an Kettenmolekülen im Schergefälle		

- Molekulardynamische Rechnungen an Makromolekülmodellen
- Computersimulation der Molekülbewegungen in flüssigem Äthan

Fachbereich 9, Physikalische Ingenieurwissenschaft **586** **285**

- Instationäre Profil- und Wirbelumströmung mit abgelöster Wirbelstraße
- Mehrkomponenten- Filmverdunstung im Rohr
- Erfassung partieller Ablösegebiete auf der Basis verallgemeinerter Grenzschichtlöser
- Numerische Untersuchung der Poissongleichung für die Druckberechnung
- Untersuchung einer ebenen Scherschicht zwischen zwei Gasen mit unterschiedlicher Dichte
- Untersuchung mathematischer Modelle für den Fahrer als Fahrzeuglenker
- FE-Berechnungen von Reifenstrukturen
- Fahrwerkstöße im PKW

Fachbereich 10, Verfahrenstechnik **798** **340**

- Rechnergestützte Untersuchungen instabiler Betriebsverhaltens von Wärmeversorgungen
- Instationäre dynamische Transportvorgänge in Rohren
- Umströmung und Wärmeübergang an hintereinander angeordneten Rohren
- Instationäre Umströmung und Wärmeübergang an einer schwingenden Platte
- Numerische Berechnung verfahrenstechnischer Probleme im Hubstrahler
- Instationäre Umströmung von Partikeln
- Strömung und Stofftransport in Rührgefäßen

Fachbereich 12, Verkehrswesen **120** **62**

- Aerothermodynamik
- Auswertung und graphische Darstellung von Geschwindigkeitsmessungen im Windkanal
- Numerische Berechnung von Wärmeleitungsproblemen

- Überkritisches Verhalten von Plattenträgerwandungen

Große Projekte aus Niedersachsen

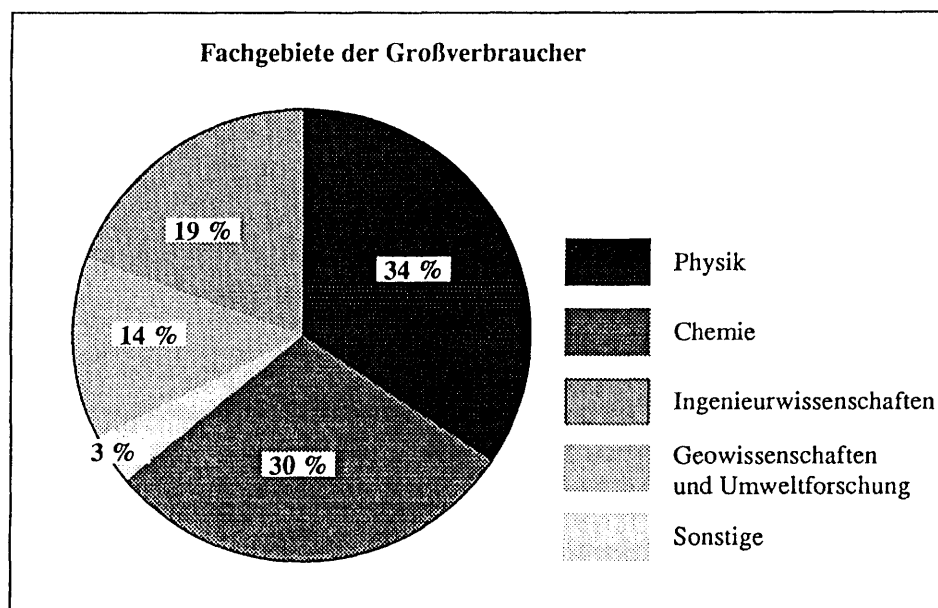
- Polynomapproximation durch Operatoren mit endlichem Träger	152	62
- Berechnung elektronischer Eigenschaften von Legierungen und Interface-Strukturen	265	112
- Berechnung elektronischer Eigenschaften von Atomen, Molekülen und Festkörpern	168	72
- Numerische Modellrechnungen zur zeitlichen Entwicklung von dichten Gas-Stern-Systemen	106	45
- Ab initio Berechnung von Molekülpotentialen	158	75

Große Projekte aus Schleswig-Holstein

- Modell schiefer Rotator	203	91
---------------------------	------------	-----------

3.2.4 Verteilung auf Fachgebiete

Die oben aufgeführten Fachbereiche mit großem Verbrauch und die großen Projekte aus den norddeutschen Partnerländern haben seit der Einführung von UNICOS 84 % der insgesamt an Benutzer abgegebenen CPU-Zeit der CRAY X-MP/24 in Anspruch genommen. Abbildung 3 zeigt für diesen Benutzerkreis die Verteilung der verbrauchten CPU-Zeit auf die Hauptfachgebiete.



3.3 Kooperationen

3.3.1 Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM)

Mit der BAM existiert seit 1988 ein Kooperationsvertrag. Ziel der Zusammenarbeit ist der effektive Einsatz des Hochleistungsrechners des ZIB für einschlägige Forschungsaufgaben der BAM. Die Kooperation berührt folgende Teilgebiete:

- Sicherstellung angemessener und stabiler Produktionsbedingungen für die Rechenaufträge der BAM
- Laufende Anpassung der technischen Datenkommunikation an den sachlich gebotenen technischen Stand
- Optimierung von Software für Hochleistungsrechner
- Methodische und technische Unterstützung der Endbenutzer in der BAM

Im Rahmen der Kooperation wird ein wissenschaftlicher Mitarbeiter des ZIB für die wissenschaftlich-methodische Unterstützung der Endbenutzer und für die Beantwortung wissenschaftlich-technischer Fragen in der BAM beschäftigt. Ein wesentliches Ziel der Kooperation ist die Erschließung hochwertiger Software für Finite-Element-Berechnungen.

Im Rahmen der Kooperation konnte der schnelle Hintergrundspeicher (SSD) der CRAY X-MP/24 erweitert werden und somit eine bessere technische Basis für Anwendungen mit hohen Ein/Ausgabe-Anforderungen, wie sie gerade im Bereich der Ingenieurwissenschaften häufig vorkommen, schaffen.

3.3.2 Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH (HMI)

Am 9. 11. 1989 wurde eine Kooperation zwischen HMI und ZIB vereinbart (für zunächst vier Jahre) mit dem Ziel, Methoden der verteilten Datenverarbeitung zu realisieren. Am Beispiel von wissenschaftlichen Anwendungen des HMI sollen allgemeine Verfahren entwickelt werden, die in Zukunft vom ZIB der gesamten wissenschaftlichen Nutzerschaft zur Verfügung gestellt werden können. Wesentliche Merkmale sind die Nutzung verteilter Ressourcen, bestehend aus graphischen Workstations, lokalem Compute-Server und Höchstleistungsrechner (beim ZIB). Diese sollten von den Anwendern in möglichst gleichförmiger Weise anzusprechen sein. Die wesentlichen Schwerpunkte der Kooperation sind:

- Erschließung und Erweiterung existierender Netzdienste
- Bereitstellung einer Umgebung zur komfortablen Entwicklung verteilter Anwendungen und zur Aufteilung bestehender Anwendungen
- Bereitstellung einer Umgebung zur Visualisierung komplexer naturwissenschaftlicher Vorgänge

In die Kooperation werden eingebracht:

- vom HMI: - Hochleistungsworkstation inklusive der notwendigen Netzeinbindungskomponenten
- Manpower im Umfang von etwa 4 MJ/Jahr
- vom ZIB: - entgeltfreie Rechenzeit auf der CRAY X-MP/24 (100 Systemstunden/Jahr)
- Netzeinbindungskomponenten
- Manpower im Umfang von etwa 1MJ/Jahr

In der ersten Phase des Projekts (zwei Jahre) sollen Hardwareaufbau, Systemintegration, Entwicklung einer ersten Version einer Betriebssystem-Schale zur Abwicklung der Prozeßverteilung sowie erste Einsätze erfolgen. In der zweiten Phase (etwa ein Jahr) ist eine Homogenisierung des Gesamtsystems und zunehmender Anwendereinsatz geplant. Die genauen Zielsetzungen der dritten Phase werden mit Abschluß der zweiten definiert. Im wesentlichen wird die letzte Phase die Integration der entwickelten "scientific workstation"-Umgebung in die Rechnernetze des HMI und anderer Partner des ZIB beinhalten.

Bis Ende des Jahres 1989 wurde folgendes realisiert:

- Auswahl und Beschaffung geeigneter Systemhardware und Software einschließlich der Netzkomponenten (im HMI)
- Aufbau der Workstations und der entsprechenden Netzkomponenten (im HMI)
- Vergleich von Remote-Procedure-Call-Diensten
- Entwicklung von Kommunikationssoftware zur Kopplung von Workstations im HMI und der CRAY im ZIB, zunächst über eine 64-kBit/s-Leitung (zukünftig 2 MBit/s)
- exemplarische Realisierung von verteilten Anwendungen zu Problemen aus der theoretischen Festkörperphysik (Gitterschwingungen)

Dazu gehörte insbesondere die Entwicklung:

- von Kommunikationssoftware zur Durchführung von Remote-Procedure-Calls
- von numerischer Software, sowohl für Workstations wie auch in vektorisierter Form für die CRAY
- einer graphischen Benutzerschnittstelle (auf der Basis von PHIGS)

4. Wissenschaftlich-Technische Dienste

4.1 Bibliothek

Das bisher verwendete, auf SAS basierende Bibliothekverwaltungssystem wurde, bedingt durch den Wegfall der MVS-Anlage, auf eine PC-Lösung umgestellt. Nach verschiedenen Tests wurde für die Datenerfassung und -verwaltung LARS von der Firma midas ausgewählt. Dieses System bietet sehr schnelle und recht komfortable Suchmechanismen. Es eignet sich daher gut für das von uns vertretene Bibliothekskonzept, Formalerschließung einfach und effektiv zu gestalten (soviel RAK-WB wie nötig, so wenig wie möglich) und stattdessen die Möglichkeiten der Datenverarbeitung vernünftig einzusetzen. Die Umstellung war, sieht man von Eigenheiten der LARS-Dokumentation ab, problemlos.

Zur Erstellung von Listen u. ä. wird - veranlaßt durch gewissen Ungereimtheiten im Reportteil von LARS - wie bisher SAS eingesetzt, das auf einer SUN-station weiterhin zur Verfügung steht. In diesem Zusammenhang wurden die PCs in unser Ethernet integriert. Über das Netz erfolgt auch der Austausch der Datenbestände zwischen den PCs. Dieses Vorgehen hat den zusätzlichen Vorteil, daß durch die Verbindung der Bibliotheksverwaltung mit dem LAN ein erster Schritt getan wurde, um den Katalog der Bibliothek über die zahlreichen Workstations im Hause zugänglich zu machen.

4.2 Reportwesen

Im Berichtszeitraum wurden zehn Preprints und acht Technical Reports herausgegeben (s. Liste der Veröffentlichungen in Abschnitt 5.1 und 5.2). Die Zahl der wissenschaftlichen Einrichtungen, mit denen ein gegenseitiger Austausch der Veröffentlichungen vereinbart ist, erhöhte sich auf 38, weitere ca. 100 Interessenten erhalten regelmäßig Veröffentlichungen des ZIB. Die Erschließung der eingehenden Reports und Sonderdrucke (z. Z. knapp 4.000 Titel) wurde ebenfalls auf die neue Bibliotheksverwaltung umgestellt.

4.3 Elektronik-Labor

Eine im Elektronik-Labor entwickelte LAN-Überwachungseinrichtung ging in den Probebetrieb. Ziel dieser Einrichtung ist es, einen umfassenden Überblick über das weitläufige lokale Netzwerk des ZIB zu erhalten und damit Störungen und sich anbahnende Fehlersituationen frühzeitig zu erkennen.

Der Entwicklung lag die Erfahrung zugrunde, daß ein ausgedehntes Netzwerk, in das Router, Bridges und Modemstrecken integriert sind, ständig durch ein anpassungsfähiges verteiltes Analysesystem überwacht werden muß, das mit dem Netzwerk mitwachsen kann. Um diesen Anforderungen gerecht zu werden, wurde ein Ethernet-Controller auf einer Europakarte mit VME-BUS-Interface entwickelt. Diese Karte bildet zusammen mit einem 68.000-CPU-Board eine preiswerte Überwachungsstation, von der an jedem zu überwachenden Teilnetz ein Exemplar angeschlossen wurde.

Die für diese Geräte entwickelte Software bewirkt, daß in jedem Teilnetz in 5-sec-Intervallen die prozentuale Nutzung, die Framezahl, die Kollisionszahl und die Fehlerzahl gemessen wird. Die Meßdaten werden an eine Master-Station gesendet, die die Daten sammelt und an einen nachgeschalteten PC weitergibt. Der PC bietet einen ständigen Überblick über das aktuelle Geschehen auf dem Netzwerk, indem er die empfangenen Daten tabellarisch oder graphisch aufbereitet und auf seinem Bildschirm darstellt. Er speichert laufend alle Maßdaten, so daß sich Fehlersituationen rückverfolgen lassen. Bleiben die Daten einer Slave-Station aus, z. B. durch eine defekte Bridge oder eine fehlerhafte Modemstrecke, so gibt der PC optischen und akustischen Alarm. Bereits während des Probebetriebes mit einem Teilausbau des Systems konnten fehlerhafte Komponenten - software und hardware - festgestellt werden, deren Fehlverhalten zu "schleppendem Betrieb", scheinbarer Netzüberlastung o. ä. geführt hatten.

5. Veröffentlichungen, Vorträge, verfügbare Produkte

5.1. Preprints

SC 89-1. Zha Hongyuan. *A Numerical Algorithm for Computing the Restricted Singular Value Decomposition of Matrix Triplets.*

Abstract: This paper presents a numerical algorithm for computing the restricted singular value decomposition of matrix triplets (RSVD). It is shown that one can use unitary transformations to separate the regular part from a general matrix triplet. After preprocessing on the regular part, one obtains a matrix triplet consisting of three upper triangular matrices of the same dimensions. The RSVD of this special matrix triplet is computed using the implicit Kogbetliantz technique. The algorithm is well suited for parallel computation.

SC 89-2. Zha Hongyuan . *Restricted Singular Value Decomposition of Matrix Triplets.*

Abstract: In this paper we introduce the concept of restricted singular values (RSV's) of matrix triplets. A theorem concerning the RSV's of a general matrix triplet (A,B,C) , where $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$, $B \in \mathbb{C}^{m \times p}$ and $C \in \mathbb{C}^{q \times n}$, which is called restricted singular value decomposition (RSVD) of matrix triplets, is derived. This result generalizes the wellknown SVD, GSVD and the recently proposed product induced SVD (PSVD). Connection of RSV's with the problem of determination of matrix rank under restricted perturbation is also discussed.

SC 89-3. Wu Huamo. *On the Possible Accuracy of TVD Schemes.*

Abstract: The paper presents a detailed analysis of the possible accuracy available for TVD schemes in one dimension with emphasis to the semi-discrete 1-D TVD schemes. The analysis shows that the widely accepted statement [1] of degeneration of accuracy at critical points for TVD schemes should be corrected. We have theorem: TVD schemes using flux limiters ϕ of the form [1], [2] may be second-order accurate at critical points if $\phi(3) + \phi(-1) = 2$, but cannot be uniformly second-order accurate in the whole neighborhood of critical point. If $\phi(1) = 1$, then the TVD schemes are second-order accurate in the region of smooth solutions sufficiently far from the critical points. Two ways are suggested to improve the accuracy. Numerical example is given.

SC 89-4. H. Michael Möller. *Multivariate Rational Interpolation: Reconstruction of Rational Functions.*

Abstract: In this paper we consider the problem of reconstructing a multivariate rational function, when only its values at sufficiently many points are known. We use for the reconstruction of bivariate rational functions a bivariate rational interpolation operator investigated by Siemaszko [7] and a new one, compare both by examples in a Computer Algebra system, and present their multivariate generalizations.

SC 89-5. Ralf Kornhuber; Rainer Roitzsch. *On Adaptive Grid Refinement in the Presence of Internal or Boundary Layers.*

Abstract: We propose an anisotropic refinement strategy which is specially designed for the efficient numerical resolution of internal and boundary layers. This strategy is based on the directed refinement of single triangles together with adaptive multilevel grid orientation. It is demonstrated by several numerical examples that compared to usual methods, the new anisotropic refinement ends up in more stable and more accurate solutions at much less computational cost.

SC 89-6. Wu Huamo; Yang Shuli. *MmB - A New Class of Accurate High Resolution Schemes for Conservation Laws in Two Dimensions.*

Abstract: In this paper we present the MmB schemes, which preserve the local maximum and minimum bounds of the initial data in the smallest union of mesh elements of previous time step containing the domain of dependence of the solution on the mesh element with center at point P under consideration. In 1-D, the MmB schemes are almost identical with TVD schemes. As well-known, there is no second-order TVD scheme in 2-D, nevertheless, we present here two classes of 2-D second-order accurate MmB-schemes. It is proved that 1-D discrete MmB (or TVD) and 1-D semi-discrete TVD schemes may have second-order accuracy at (nonsonic) critical points, but cannot be of uniformly second-order accurate in the whole neighborhood of the critical points. New accurate high resolution flux limiters are suggested. Numerical results for 1-D and 2-D test problems are given.

SC 89-7. Uwe Budde; Michael Wulkow. *Computation of Molecular Weight Distributions for Free Radical Polymerization Systems.*

Abstract: Modeling of free radical polymerization leads to very large and usually stiff systems of ordinary differential equations which cannot be solved directly in an efficient way.

This paper presents the application of a new approach called discrete Galerkin method to a realistic example - the polymerization of methyl methacrylate(MMA). The method is characterized by a Galerkin approximation on the basis of orthogonal polynomials of a discrete variable which represents the polymer degree. It allows the efficient computation of solutions of complete kinetic schemes with time- or moment-dependent reaction coefficients by reducing the complexity to a few differential equations. The approximation error can be

controlled by an error estimation. In the case of MMA polymerization a reduction of computational effort by a factor of about 25 compared to a standard method can be obtained for the quasi-steady-state approximation of the model. In addition solutions of the instationary kinetic scheme can be easily computed.

SC 89-8. Gerhard Maierhöfer. *Ein paralleler adaptiver Algorithmus für die numerische Integration.*

Abstract: Der Bericht ist die Ausarbeitung eines Vortrages, der auf dem Transputer Anwender Treffen (TAT '89) im September 1989 gehalten wurde. Es wird die Parallelisierung und Implementierung eines adaptiven Algorithmus zur numerischen Integration (Romberg Quadratur) beschrieben. Ausgewählte Meßergebnisse sind enthalten.

SC 89-9. Harry Yserentant. *Two Preconditioners Based on the Multil-Level Splitting of Finite Element Spaces.*

Abstract: The hierarchical basis preconditioner and the recent preconditioner of BRAMBLE, PASCIAK and XU are derived and analyzed within a joint framework. This discussion elucidates the close relationship between both methods. Special care is devoted to highly nonuniform meshes; our theory is based exclusively on local properties like the shape regularity of the finite elements.

SC 89-10. Ronald H. W. Hoppe. *Numerical Solution of Multicomponent Alloy Solidification by Multi-Grid Techniques.*

Abstract: The solidification of an N -component alloy is described by an initial boundary value problem for a system of degenerate parabolic equations modelling heat conduction and mass diffusion. Discretizing implicitly in time and by piecewise linear finite elements in the space variables, at each time step the solution of a system of quasivariational inequalities is required. For the numerical solution of that system, a multi-grid algorithm is developed by making use of game theoretic concepts and duality arguments from convex analysis. Finally, the efficiency of the algorithm is demonstrated by displaying numerical results for a ternary alloy.

5.2 Technical Reports

TR 89-1. *CRAY-Handbuch. Einführung in die Benutzung der CRAY X-MP unter UNICOS.*

TR 89-2. P. Deuffhard. *Numerik von Anfangswertmethoden für gewöhnliche Differentialgleichungen.*

Abstract: Das vorliegende Skriptum entstand aus einer Vorlesung, die ich im WS 87/88 an der Freien Universität Berlin im Fachbereich Mathematik gehalten habe. Mein ursprüngliches Vorlesungsmanuskript wurde von Herrn F. Bornemann in weiten Teilen überarbeitet, reorganisiert und substantiell ergänzt. Der Inhalt stammt größtenteils aus Originalarbeiten jüngerer Datums. Darüberhinaus finden sich zahlreiche Teile, die aus meiner jahrelangen Beschäftigung mit dem Thema entstanden aber unpubliziert geblieben sind. Das Skriptum erhebt *nicht* den Anspruch, ein *Lehrbuch* zu sein. Es war zunächst als Ausarbeitung für meinen studentischen Hörerkreis sowie als internes Arbeitspapier für das ZIB bestimmt. Die Kunde von der bloßen Existenz eines solchen Skriptums hat jedoch zu einer derart regen Nachfrage geführt, daß es hiermit als Technischer Report des ZIB einer breiteren Öffentlichkeit zugänglich gemacht werden soll. In der vorliegenden Form richtet es sich in erster Linie an *Mathematiker*; es soll sich jedoch auch für *Naturwissenschaftler* und *Ingenieure* eignen, die sich einen Einblick in den theoretischen und algorithmischen Hintergrund der von ihnen verwendeten wissenschaftlichen Software verschaffen wollen.

TR 89-3. Artur Rudolf Walter. *Ein Finite-Element-Verfahren zur numerischen Lösung von Erhaltungsgleichungen.*

Abstract: A new approach for the discretisation of hyperbolic conservation laws via a finite element method is developed and analysed. Appropriate forms of the Euler's equation of gas dynamic are considered to employ the algorithm in a reasonable way for this system of nonlinear equations. Both mathematical and physical stability results are obtained. A main part of the paper is devoted to the convergence proof with energy methods under strong regularity of the solution of a scalar nonlinear conservation law. Some hints on the implementation and numerical results for the calculation of transonic gasflow through a Laval nozzle are given. The necessary amount of numerical work is compared to an established finite difference method and the efficiency of the algorithm is shown. A survey on recent literature about finite element methods for hyperbolic problem is included.

TR 89-4. Rainer Roitzsch. *KASKADE User's Manual. Version 1.0*

Abstract: The User's Manual contains an introduction to the usage of the C-KASKADE implementation. KASKADE is an adaptive finite element code (see SC 88-5). The manual includes a description of all commands, a simple recipe to define a new problem by changing the KASKADE source and a complete example.

TR 89-5. Rainer Roitzsch. *KASKADE Programmer's Manual. Version 1.0*

Abstract: The Programmer's Manual contains the documentation of the C-KASKADE implementation. KASKADE is an adaptive finite element code (see SC 88-5). The interfaces of all modules are described.

TR 89-6. Herbert Melenk; Winfried Neun. *Implementation of Portable Standard LISP for the SPARC Processor.*

Abstract: The SPARC processor is a RISC (Reduced Instruction Set Computer) microcomputer, built into the SUN4 workstations. Since RISC processors are very well-suited for LISP processing, the implementation of a dialect of LISP (Portable Standard LISP, PSL) boded well for a great speed-up in comparison with other types of microcomputers. A first approach was done at The RAND Corporation in Santa Monica, which was derived from classical processor types like MC68000 or VAX. At the Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) that initial implementation was redesigned in order to adapt PSL to the specific features of the SPARC processor. The present implementation, in some parts, is very close to Cray PSL version also done in ZIB. Some timing informations are given in the appendix.

TR 89-7. Folkmar A. Bornemann. *Adaptive multilevel discretization in time and space for parabolic partial differential equations.*

Abstract: The present paper develops an adaptive multilevel approach for parabolic PDE's - as a first step, for one linear scalar equation. Full adaptivity of the algorithm is conceptually realized by simultaneous multilevel discretization in both time and space. Thus the approach combines multilevel time discretization, better known as extrapolation methods, and multilevel finite element space discretization such as the hierarchical basis method. The algorithmic approach is theoretically backed by careful application of fundamental results from semigroup theory. These results help to establish the existence of asymptotic expansions (in terms of time-steps) in Hilbert space. Finite element approximation then leads to perturbed expansions, whose perturbations, however, can be pushed below a necessary level by means of an adaptive grid control. The arising space grids are not required to satisfy any quasi-uniformity assumption. Even though the theoretical presentation is independent of space dimension details of the algorithm and numerical examples are given for the 1-D case only. For the 1-D elliptic solver, which is used, an error estimator is established, which works uniformly well for a family of elliptic problems. The numerical results clearly show the significant perspectives opened by the new algorithmic approach.

TR 89-8. Gerhard Maierhöfer; Georg Skorobohatyj. *Implementierung des parallelen Trapex auf Transputern.*

Abstract: Der folgende Bericht ist eine Ergänzung des ZIB Technical Report TR 88-5. Entsprechend wird hier nicht auf die grundsätzlichen Fragen der Parallelisierbarkeit des sequentiellen TRAPEX eingegangen. Diese sind im TR 88-5 erörtert, die dort beschriebenen Algorithmen (vertikale und horizontale Parallelisierung) werden auch für die Transputerarchitektur verwendet. Meßergebnisse sind im letzten Teil angefügt.

5.3 Sonstige Reports

1. K.-D. Engel
Multimedia-Dokumente im ISDN-B, Anforderungsanalyse, Version 3.0
Projektbericht, Januar 1989
2. K.-D. Engel
Analyse relevanter Normen und Empfehlungen zur verteilten Bearbeitung multimedialer Information im ISDN-B
BERKOM-Dokumentation Band V, Version 2.0, Mai 1989
3. K.-D. Engel
BERKOM Reference Model II, Application-Oriented Recommendations
Version 2.0, erscheint Anfang 1990
4. A. Gavras, G. Goldacher, K. Jacobsen, T. Luckenbach, R. Ruppelt, R. Schmidt
*Projekt BERGATE - Hard- und Software-Aufbau des BERGATE-Transitsystems -
Systemspezifikation*
Bericht zum 3. BERGATE-Meilenstein, Berlin, März 1989
5. U. Nowak, U. Pöhle
*Entwicklung einer Zeitschrittweitenkontrolle für ein Programm zur Simulation von Feuchte-
und Wärmetransport in zwei Raumdimensionen"*
Projektbericht, November 1989

5.4 Veröffentlichungen

1. M. Bloß, R. H. W. Hoppe:
*Numerical Computation of the Value Function of Optimally Controlled Stochastic Switching
Processes by Multi-Grid Methods.*
Numer. Funct. Anal. Optimization 10, p. 275 - 304 (1989)
2. P. Deuflhard:
Recent Developments in Chemical Computing.
DECHEMA, Papers of a European Symposium, Vol. 116, 339 - 341 (1989)
3. P. Deuflhard:
Numerical Treatment of Implicit Differential Equations and Differential Algebraic Systems.
ZAMM - Z. angew. Math. Mech. 69, 4, T 32 (1989)
4. P. Deuflhard, P. Leinen, H. Yserentant:
Concepts of an Adaptive Hierarchical Finite Element Code.
IMPACT of Computing in Science and Engineering 1, p. 3 - 35 (1989)
5. P. Deuflhard, M. Wulkow:
*Computational Treatment of Polyreaction Kinetics by Orthogonal Polynomials of a Discrete
Variable.*
IMPACT of Computing in Science and Engineering 1, p. 269 - 301 (1989)

6. G. Goldacker, K. Jacobsen, T. Luckenbach, R. Ruppelt, R. Schmidt, M. Vogelsänger:
BERGATE - ein Transitsystem zur Kopplung von MAP/TOP-Netzen über das BERKOM-Testnetz.
GI/ITG '89, Stuttgart, Februar 1989
7. H. C. Hege, M. Makino, A. Nakamura, Y. Tago:
Simulation of full QCD on VP400E by an exact algorithm.
Proceedings of the 1988 Symposium on Lattice Field Theory, Fermi National Accelerator Laboratory, Batavia / USA, Sept. 1988, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.), p. 484 - 489 (1989)
8. H. C. Hege, A. Nakamura:
Phase Structure of Compact Lattice (QED with Dynamical Wilson Fermions).
Proc. Int. Workshop in Strong Coupling Gauge Theories, Nagoya / Japan, Aug. 1988, World Scientific, p. 227 - 239 (1989)
9. H. C. Hege, A. Nakamura:
Phase Structure of Compact Lattice Quantum Electrodynamics with Dynamical Fermions.
Proceedings of the 1988 Symposium on Lattice Field Theory, Fermi National Accelerator Laboratory, Batavia / USA, Sept. 1988, Nucl. Phys. B (Proc. Suppl.), p. 114 - 118 (1989)
10. R. H. W. Hoppe, R. Kornhuber:
Numerical Simulation of Induction Heating Processes by Multi-Grid Techniques.
In: Numerical Methods in Thermal Problems, Vol. VI (eds.: R. W. Lewis and K. Morgan), p. 1142 - 1152, Pineridge Press, Swansea (1989)
11. R. H. W. Hoppe, H. D. Mittelmann:
A Multi-Grid Continuation Strategy for Parameter-Dependent Variational Inequalities.
J. Comput. Appl. Math. 26, p. 35 - 46 (1989)
12. P. Wust, J. Nadobny, R. Felix, P. Deuflhard, W. John, A. Louis:
Numerical Approaches to Treatment Planning in Deep RF-Hyperthermia.
Strahlenther. Onkol. 165 (Nr. 10), 751 - 757 (1989).

5.5 Vorträge

H. BUSCH

22./23./24.2.1989

Einführung in UNICOS

Technische Universität Braunschweig

19.4.1989 / 18.10.1989

UNICOS auf der CRAY

Benutzerkolloquium der ZRZ, Technische Universität Berlin

25.4.1989

COS to UNICOS Migration at ZIB

23. CRAY User Group Meeting, Los Angeles, CA. / USA

P. DEUFLHARD

17.1.1989

Adaptive hierarchische Finite-Element-Methoden

Universität Augsburg, Institut für Mathematik, DFG Forschungsschwerpunkt

7.3.1989

Diskrete Galerkin-Methoden für Probleme der Polymer-Chemie

Humboldt-Universität, Sektion Mathematik, Ost-Berlin

3.4.1989

Das wissenschaftliche Konzept des ZIB

Seminar ZIB - GMD, Sankt Augustin

25.4.1989

Recent Developments in Chemical Computing

European Symposium on Computer Application in the Chemical Industry, Erlangen

Invited talk

2.6.1989

Concepts of an Adaptive Hierarchical Finite Element Code

Sir George Cayley Institute, The Polytechnic of Central London

20.6.1989

Concepts of an Adaptive Hierarchical Finite Element Code

Conference on Preconditioned Conjugate Gradient Methods, University of Nijmegen,

Invited talk

23.6.1989

Topological Derivation of Global Gauss-Newton Methods

International Conference on Numerical Methods in Optimization and Optimal Control,

Universität Trier,

Invited talk

29.6.1989

Uniqueness Theorems for Stiff ODE Initial Value Problems

13th Biennial Conference on Numerical Analysis, University of Dundee,

Invited talk

7.7.1989

Adaptive numerische Methoden zur Berechnung reaktiver Strömungen

Regionales Rechenzentrum der Universität Stuttgart (RUS), Stuttgart

19.7.1989

Inexact Newton Techniques for Adaptive Hierarchical Finite Element Computations

SIAM Meeting San Diego,

Invited mini-symposium talk

24.7.1989

1. *Concepts of an Adaptive Hierarchical Finite Element Method*
 2. *Inexact Newton Multilevel Methods for Nonlinear PDE's*
- TICOM Seminar (Texas Institute of Computational Mechanics), Austin

11.9.1989

- Adaptive Inexact Newton Methods for Nonlinear PDE's*
5. Internationales Symposium on Numerical Methods in Engineering, Lausanne,
Invited mini-symposium talk

14.12.1989

- Adaptive numerische Lösungen von partiellen Differentialgleichungen*
Universität Bielefeld, Fakultät für Physik

J. GOTTSCHESKI

26.4.1989

- Evolving from Data Center to Network Node for Scientific Computing*
23. CRAY User Group Meeting, Los Angeles, CA. / USA

H. C. HEGE

16.1.1989

- Kompakte QED mit dynamischen Fermionen auf dem Gitter*
Freien Universität Berlin, Fachbereich Physik

6.2.1989

- Neue Monte-Carlo-Algorithmen zur Simulation von bosonischen und fermionischen Theorien*
Freien Universität Berlin, Fachbereich Physik

15.3.1989

- QCD on SUPRENUM machine*
Poster-Vortrag (mit E. Kehl und E. Laermann)
The First Gentner-Symposium in the Mathematical Sciences, "Science and Computation",
Neve Ilan / Israel

10.5.1989

- Computeranimation*
Gesellschaft für Mathematik und Datenverarbeitung (GMD), St. Augustin

21.7.1989

- Exact algorithms for simulation of Lattice Gauge Theories with dynamical fermions*
Interdisziplinäres Projektzentrum für Supercomputing der ETH-Zürich, Zürich / Schweiz

25.10.1989

- Verbesserung der Vektorisierung durch ein neues FORTRAN-Übersetzersystem*
Technische Universität Berlin, ZRZ-Kolloquium.

15.11.1989

- Das neue Übersetzersystem cf77 auf der CRAY*
Technischen Universität Braunschweig, Rechenzentrum.

R. H. W. HOPPE

11.4.1989

Multi-Grid Solution of Two Coupled Stefan Equations Arising in Induction Heating of Large Steel Slabs

4th Copper Mountain Conference on Multigrid Methods, Copper Mountain, Colorado / USA

13.6.1989

Numerische Simulation der induktiven Aufheizung großer Stahlplatten mit Hilfe von Mehrgittermethoden

Freie Universität Berlin, FB Mathematik, Seminar Scientific Computing.

22.6.1989

Numerische Lösung freier Randwertprobleme mit Mehrgitterverfahren

Universität Heidelberg, Institut für Angewandte Mathematik.

4.7.1989

Numerical Simulation of Induction Heating Processes by Multi-Grid Techniques

6th International Conference on Numerical Analysis in Thermal Problems,
Swansea / United Kingdom

R. KORNHUBER

16.6.1989

Zur adaptiven Gittergenerierung in der Nähe von Grenzschichten

Universität Kiel

23.1.1989

Zur adaptiven Gittergenerierung in der Nähe von Grenzschichten

Universität Stuttgart

H. MELENK

8. 1. 1989

Computer Algebra und Vektorrechner

Interdisziplinäres Projektzentrum für Supercomputing der ETH-Zürich, Zürich / Schweiz

19. 7 1989

Decomposition of Polynomial Equation Systems by Gröbner Type Methods.

International Symposium on Symbolic and Algebraic Computation (ISSAC-89),

Portland (Oregon)

Invited talk

18. 12 1989

Solving Polynomial Equation Systems by Gröbner Type Methods on a Computer.

Opening of the Expertise Centre Computer Algebra in The Netherlands,

Expertise Centre CAN, Amsterdam

Invited talk

U. NOWAK

13.6.1989

Numerische Integration mit semi-impliziten Extrapolationsverfahren.

Workshop "Numerische Integration bei Mehrkörpersystemen", Universität Augsburg

4.10.1989

Adaptive Finite-Differenzen-Verfahren für parabolische Differentialgleichungen mit Fehlerkontrolle in Raum und Zeit.

5. TECFLAM Seminar, Stuttgart

10.11.1989

Numerische Lösung von eindimensionalen parabolischen Systemen mit adaptiven und bewegten Gittern.

Institut für Systemdynamik und Regelungstechnik, Universität Stuttgart

R. WESEL

18.10./13.12.1989

Das Arbeiten auf der CD-Anlage unter dem Betriebssystem NOS/VE ZEDAT

Freie Universität Berlin

M. WULKOW

30.1.1989

Computational Treatment of Polyreaction Kinetics

Seminar "Scientific Computing", Freie Universität Berlin, Fachbereich Mathematik

27.9.1989

Discrete Galerkin Method applied to MMA Polymerization

Third International Workshop on Polymer Reaction Engineering, Technische Universität Berlin

Postersession

5.10.1989

Erfahrungen und Überraschungen mit dem Taschenrechner

Freie Universität Berlin, Fachbereich Mathematik

Schülerseminar

5.6 Verfügbare Produkte

CODELIB

Das ZIB entwickelt und unterhält eine Sammlung von Algorithmen, genannt CODELIB, für Anwendungen auf dem Gebiet "Scientific Computing". Diese Aufstellung umfaßt die Namen der bisher vom ZIB in diesem Zusammenhang bearbeiteten Produkte und eine kurze Charakterisierung. Ein ausführliches Verzeichnis der CODELIB sowie Produktinformationen, Weitergabebedingungen und Preisliste können vom ZIB angefordert werden.

1. Nichtlineare Gleichungssysteme und Ausgleichsrechnung

- NLEQ1 Newton-Verfahren, vollbesetzte Jacobi-Matrix, ohne Rangentscheidung
- NLEQ1S Newton-Verfahren, dünnbesetzte Jacobi-Matrix, ohne Rangentscheidung
- NLEQ2 Newton-Verfahren, vollbesetzte Jacobi-Matrix, mit Rangentscheidung
- NLSCON Gauß-Newton-Verfahren für nichtlineare Ausgleichsrechnung

2. Lösung von Anfangswertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

- EULEX Nichtsteife Systeme erster Ordnung, Explizite Euler-Diskretisierung
mit h-Extrapolation
- DIFEX1 Nichtsteife Systeme erster Ordnung, Explizite Mittelpunktsregel mit
h²-Extrapolation
- DIFEXM Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Störmer-Diskretisierung mit
h²-Extrapolation
- KEPLEX Nichtsteife Systeme zweiter Ordnung, Kepler-Diskretisierung mit
h²-Extrapolation.
- EULSIM Steife Systeme erster Ordnung, Semi-implizite Euler-Methode mit h-Extrapolation
- METAN1 Steife Systeme erster Ordnung, Semi-implizite Mittelpunktsregel mit
h²-Extrapolation
- LIMEX Extrapolationsverfahren mit h-Extrapolation, linear-implizite
differentiell-algebraische Systeme
- LARKIN Anwendungen der chemischen Kinetik

3. Lösung von Randwertaufgaben gewöhnlicher Differentialgleichungen

- BVPSOL** Mehrzielmethode mit explizitem oder semi-implizitem Integrator und Newton Verfahren mit condensing Algorithmus für 2-Punkt-Randwertprobleme (Standardprobleme)
- BVPSOG** Mehrzielmethode mit explizitem oder semi-implizitem Integrator und Newton Verfahren mit globalem linearen Löser für 2-Punkt-Randwertprobleme (Standardprobleme)
- BVPLSQ** Mehrzielmethode mit explizitem Integrator DIFEX1 und Gauß-Newton-Verfahren für überbestimmte 2-Punkt-Randwertprobleme
- MULCON** Mehrzielmethode mit Pfadverfolgungsmethode und condensing Algorithmus für parameterabhängige 2-Punkt Randwertprobleme

PSL / REDUCE

Portable Standard LISP (PSL) ist ein Dialekt der Programmiersprache LISP, der besonders auf hohe Rechengeschwindigkeit ausgelegt ist.

REDUCE ist ein Programmsystem für allgemeine algebraische Rechnungen für Naturwissenschaftler, Mathematiker und Ingenieure, das auf PSL aufbaut.

PSL und REDUCE wurden im ZIB für Supercomputer der CRAY-Serien sowie für mehrere Workstation-Serien der oberen Leistungsklasse implementiert. Das ZIB vertreibt diese Versionen weltweit.

GOS

GOS ist ein Programmpaket der British Museum Documentation Association für die Speicherung komplexer Informationen über Museumsprojekte. GOS wurde vom ZIB gemeinsam mit dem Institut für Museumskunde (SMPK) weiterentwickelt und wird für Rechner der Typen Siemens BS2000 und IBM MVS angeboten.

Im Berichtsjahr wurde eine Version für IBM kompatible PC's fertiggestellt und in das Angebot mit aufgenommen.

5.7 Gastvorträge im ZIB

10.1.1989

Prof. Dr. Olof Widlund, New York University, Courant Institute, New York / USA
Domain Decomposition Algorithms for Elliptic Problems

31.1.1989

Prof. Dr. Helmut Neunzert, Universität Kaiserslautern
Simulationsmethoden zur Lösung der Boltzmann-Gleichung

5.6.1989

Dr. Stefan Eichholz, TU München
Simulation verschiedener Rechnerarchitekturen auf dem PARMOD-Simulator

6.6.1989

Prof. Dr. W. C. Rheinboldt, University of Pittsburgh, Pittsburgh / USA
Zur Berechnung des 2. Fundamentalensors mit Anwendungen auf Verzweigungsprobleme

14.6.1989

Steve Wallach (Gründer der CONVEX Computer Corporation)
Status and Trends in Supercomputing

31.8.1989

Prof. Gene H. Golub, Stanford University, Stanford / USA
Numerical Solution of Linear Equations Arising from the Convection-Diffusion Equation

31.8.1989

Dr. Steven F. Ashby, Lawrence Livermore National Laboratory, Stanford / USA
Polynomial Preconditioning for Conjugate Gradient Methods

19.9.1989

Prof. Dr. Tien H. Hoang, National Center for Scientific Research (NCSR), Hanoi / Vietnam
Deductive and Inductive Reasoning in Advanced Computing

26.9.1989

Prof. Claes Johnsson, Chalmers University of Technology and University of Göteborg,
Göteborg / Sweden
Adaptive Finite Element Methods

20.10.1989

Dr. Christian Bischof, Argonne National Laboratory, Argonne / USA
Efiziente QR-Zerlegungen von singulären Matrizen

23.10.1989

Dr. Eric Grosse, AT & T Bell Laboratories, Murray Hill / USA
Netlib: Distribution of Mathematical Software by e-mail

14.11.1989

Prof. Dr. Karl-Heinz Hoffmann, Universität Augsburg
Steuerung von Phasenübergängen

28.11.1989

Prof. Lin Qun, Academia Sinica, Beijing
Mesh Refinement and Certain Kind of a Posterior Error Estimate for Finite Element Method

5.8 Arbeitskreise, Kurse, Tagungen im ZIB

9.1. - 12.1.1989
Einführung in UNICOS

8.2. - 10.2.1989
UNICOS-Administrator--Kursus

27.2. - 1.3.1989
Einführung in UNICOS

28.2.1989
Anwendertreffen "Quantenchemische Berechnungen"

6.3. - 8.3.1989
Einführung in UNICOS

27.9.1989
Workshop "Present ZIB Activities in Chemical Computing"

5.9 Informationsbesuche / Präsentationen im ZIB

14.2.1989
Vorstellung des Programms "pagemaker" der Firma SUN

26.5.1989
Informationsbesuch der Gesellschaft für neue Berufe mbH (GNB) mit Teilnehmern aus deren Kursen "Systemtechnologie Telematik" und "Systemtechnologie Marketing / Vertrieb"

13.9.1989
Präsentation der SUPRENUM GmbH

5.10 Gäste

16.5. - 26.5.1989
Dr. Gabriel Wittum, Universität Heidelberg
Forschungsaufenthalt / Zusammenarbeit mit P. Deuflhard, R. Kornhuber, R. Roitzsch

11.6.- 16.6.1989
Dr. Bernold Fiedler, Universität Heidelberg
Forschungsaufenthalt / Zusammenarbeit mit P. Deuflhard

12.6. - 23.6.1989

Dr. Andreas Griewank
Argonne National Laboratories, Argonne / USA
Forschungsaufenthalt / Zusammenarbeit mit H. Melenk

11.9. - 15.9.1989

Bernhard Schmidt, Universität Köln
Forschungsaufenthalt / Zusammenarbeit mit U. Nowak, U. Pöhle

13.9. - 15.9.1989

Prof. Dr. Jürgen Weyer, Universität Köln
Zusammenarbeit mit U. Nowak, U. Pöhle, M. Wulkow, P. Deuflhard

25.9. - 29.9.1989

Dr. Anthony C. Hearn, The RAND Corporation, Santa Monica, CA. / USA
Zusammenarbeit mit P. Deuflhard, H. Melenk, W. Neun

9.11. - 10.11.1989

S. Krömker, Universität Heidelberg
Arbeitsaufenthalt in der Software- und Graphikabteilung des ZIB

9.11. - 10.11.1989

Dr. F. Behrendt, Universität Stuttgart
Arbeitsaufenthalt in der Software- und Graphikabteilung des ZIB

5.11 Zeitschrift IMPACT

Im Berichtszeitraum erschien die neue Zeitschrift

IMPACT of Computing in Science and Engineering

oder kurz IMPACT, zum ersten Mal. Sie wird von **P. Deuflhard** als **Managing Editor** bei Academic Press, USA, herausgegeben.

Mitherausgeber sind:

I. Babuska, University of Maryland, USA
F. Brezzi, Università di Pavia, Italien
J. Dongarra, Argonne National Lab., Illinois, USA
I. Duff, Harwell Lab., Oxfordshire, Großbritannien
A. M. Erisman, Boeing, Seattle, USA
K. Feng, Academia Sinica, Beijing, VR China
J. Glimm, New York University, USA
W. Hackbusch, Universität Kiel, Bundesrepublik Deutschland
A. C. Hearn, The RAND Corporation, Santa Monica, USA
W. Jäger, Universität Heidelberg, Bundesrepublik Deutschland
E. Krause, RWTH Aachen, Bundesrepublik Deutschland
S. Levin, Cornell University, USA

O. McBryan, University of Colorado, Boulder, USA
J. Murray, University of Oxford, Großbritannien
O. Pironneau, INRIA, Le Chesnay, France
W. Rheinboldt, University of Pittsburgh, USA
U. Trottenberg, SUPRENUM GmbH, Bonn, Bundesrepublik Deutschland
J. Warnatz, Universität Stuttgart, Bundesrepublik Deutschland

Die neue Zeitschrift soll als Plattform für einen Dialog zwischen Mathematik und Informatik auf der einen Seite sowie Natur- und Ingenieurwissenschaften auf der anderen Seite dienen. Im Berichtszeitraum sind vier Hefte erschienen. Das Echo auf die Zeitschrift ist durchweg gut. Um einen Einblick in die Ziele der neuen Zeitschrift zu geben, sei hier der "Letter from the Editor" aus Heft 1, Seite 1, abgedruckt:

"Yet another journal!" This might be the first reaction of many of us as soon as a new journal is announced. I am confident, however, that your second reaction will be to ask: "What is the intention of the new journal?"

The present journal is intended to serve the scientific community as a platform for an interdisciplinary dialog at a high quality level among the fields:

- mathematical and scientific modeling,
- scientific computing,
- computer science, and
- scientific and engineering applications.

Even though there are a number of interdisciplinary journals around, the broad spectrum of techniques that are used nowadays to solve hard scientific and engineering problems is usually not represented within one journal. For this reason, Werner Rheinboldt and I responded positively to an initiative of Academic Press, brought up during ICIAM 1987 in Paris. We talked to a number of well-renowned colleagues from a variety of fields to cover the intended broad spectrum at a high quality level. Whenever we went into a detailed technical discussion, the echo turned out to be extremely encouraging. So the decision was made to start the new journal IMPACT OF COMPUTING IN SCIENCE AND ENGINEERING - or, in short, just IMPACT.

Among the above-mentioned fields, questions of *mathematical and scientific modeling* will be of interest for the new journal only if they finally deal with computing - just think of the construction of boundary conditions in fluid dynamics problems with special geometry. The field of *scientific computing* is understood as having emerged from the classical field of algorithm-oriented numerical analysis with the addition of software development, of graphical input or output, or of special data structure design - each of which may turn out to be crucial when treating real-life problems. In a number of applications, *computer science* questions are important - say, the construction of special purpose computers or the development of parallel programs on particular more recent computer architectures. Last, not least, *scientific and engineering applications* sometimes stimulate the development of new techniques - typically on the basis of thinking in terms of the underlying problem-dependent concepts. The *interdisciplinary* character of the journal will show up in the fact that typical papers should touch upon a combination of the above main

areas - with the exception of the combination modeling and applications, where other journals may be more appropriate. One of the basic aims of IMPACT will be to help the exchange of *computational know-how* among different fields of applications.

Ideal contributions to IMPACT will look at a real-life problem attacked by a new or specifically adapted algorithm or any other new computing technique. Of particular interest are those techniques that stimulate an *impact* in a specific field of scientific or engineering applications - the name of the journal is understood as the shortest formulation of its program! In each paper such an *impact* should also be made clear to non-experts, either by documentation of actual computations or by exemplification of model problems that reflect special features of real-life applications. The editors are aware that such interdisciplinary papers may be somewhat longer than those concentrating on only one field. Consequently, the journal does not impose formal restrictions on the length of papers. Each paper will be refereed by two independent anonymous referees - if possible, from the different fields that are involved.

Ideal readers of IMPACT that we have in mind are, on the one hand, mathematicians interested in seeing mathematics applied in sciences, and, on the other hand, scientists and engineers with an interest in recent developments in mathematics and computer science.

It is clear that a journal of this broad novel design will have to develop its new shape gradually - with the help of both authors and editors. I wish the journal all the best along this path of development!

Peter Deuflhard

6. Organisatorisches

Das Konrad-Zuse-Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) wurde durch Gesetz über das Zentrum für Informationstechnik (ZInfG) vom 17. Juli 1984 gegründet. Das ZIB ist eine rechtsfähige Anstalt des öffentlichen Rechts mit kaufmännischer Buchführung. Zur Erfüllung seiner Aufgaben erhält das ZIB einen Zuschuß des Landes Berlin, das auch Dienstherr und Arbeitgeber für die Beschäftigten des ZIB ist.

6.1 Organe

Organe des ZIB sind der Verwaltungsrat und der Präsident. Der **Verwaltungsrat** setzte sich wie folgt zusammen:

Prof. Dr. Kurt Kutzler, TUB, Vorsitzender - bis 31.3.1989
Prof. Dr.-Ing. Klaus Dierks, TUB, Vorsitzender - ab 1.4.1989
Prof. Dr. Michael Erbe, FUB - bis 31.8.1989
Prof. Dr. Dr. Walter Schunack, FUB - ab 1.9.1989
Prof. Dr. George Turner, Senator für Wissenschaft und Forschung - bis 16.3.1989
Dr. Hans Kremendahl, Senatsverwaltung für Wissenschaft und Forschung - ab 17.3.1989
Dr. Wolfgang Watter, Staatssekretär bei Senator für Wirtschaft und Arbeit - bis 17.3.1989
Dr. Reinhard Baumgarten, Senatsverwaltung für Wirtschaft - ab 17.3.1989
Prof. Dr. Gerhard Wilhelm Becker, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
Prof. Dr. Hans H. Stiller, Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH

Im Jahre 1989 tagte der Verwaltungsrat am 7. November und am 15. Dezember.

Präsident des ZIB ist Prof. Dr. Peter Deuflhard. Auch im Jahr 1989 ist es nicht gelungen, einen Vizepräsidenten, der zugleich Professor an der Technischen Universität Berlin sein soll, zu gewinnen

6.2 Wissenschaftlicher Beirat

Der wissenschaftliche Beirat setzt sich unverändert wie folgt zusammen:

Prof. Dr.-Ing. Konrad Zuse	-	Ehrenvorsitzender
Prof. Dr. Clemens Baack	-	Heinrich-Hertz-Institut für Nachrichtentechnik Berlin GmbH
Prof. Dr. Karl Ganzhorn	-	IBM Deutschland GmbH, Stuttgart
Herr Lebrecht Metzger	-	Nixdorf GmbH, Berlin
Dr. Heinz Schwärtzel	-	Siemens AG, München
Prof. Dr. Ulrich Trottenberg	-	SUPRENUM GmbH
Prof. Dr. Karl Zander	-	Hahn-Meitner-Institut Berlin GmbH

6.3 Personalrat

Dem Personalrat gehören unverändert an:

Peter Ertmann - Vorsitzender
Detlef Bayer
Klaus-Dietrich Engel
Jörg-Achim Jacob
Gabriele Kempf

Vertrauensmann der Schwerbehinderten ist Wolfgang Maibauer.

6.4 ZIB-Fellows

Präsident und Vizepräsident vergeben an wenige ausgewählte deutsche Wissenschaftler das **Konrad-Zuse-Fellowship**, in dessen Rahmen im Jahre 1989 die folgenden Projekte bearbeitet wurden:

Prof. Dr. H. Yserentant
Hierarchische Finite Elemente

Prof. Dr. M. Möller
Gröbner-Basis-Algorithmen

Prof. Dr. J. Weyer
AIDS-Ausbreitungsmodelle

Dr. B. Fiedler
Dynamische Systeme

Dr. E. Schrüfer
I. Symbolisch-numerische Algorithmen
II. Parallele Symbolik

Prof. Dr. R. Hoppe
Numerische Lösung freier Randwertprobleme

6.5 Mitgliedschaften

Das ZIB ist Mitglied folgender Organisationen:

1. DFN, Verein zur Förderung eines Deutschen Forschungsnetzes e. V.
2. Ecudo
3. Forum für Zukunftsenergien

4. NAG Users Association
5. SIAM
6. CRAY User Group

6.6 Wirtschaftliche Situation

Die wirtschaftliche Situation des ZIB zeichnete sich durch Kontinuität aus. Ausgabenseitig wurde weiterhin mit Rücksicht auf die Berufung eines Vizepräsidenten Zurückhaltung geübt.

Ohne die Gehälter und Dienstbezüge der planmäßigen Mitarbeiter beliefen sich die Aufwendungen im Berichtsjahr auf 8.308 TDM. Davon entfielen auf Investition 1.056 TDM und damit 4.765 TDM weniger als im Vorjahr, als die Speichererweiterung für die CRAY-Anlage beschafft worden war.

Das Land Berlin leistete einen Zuschuß von 7.446 TDM. Die eigenen Erträge aus Kooperationen und Drittmittelprojekten betragen im Berichtsjahr 862 TDM.

Ein besonderes Problem bestand darin, daß es auch im Jahr 1989 nicht gelungen ist, für den Neubau des ZIB ein geeignetes Grundstück zu finden. Der Neubau selbst ist finanziell abgesichert und muß wegen vertraglicher Verpflichtungen spätestens Ende 1994 beziehbar sein.

6.7 Personal

Für die planmäßigen Mitarbeiter (7 Beamten- und 88 Angestelltenstellen) waren im Haushaltsplan des Landes Berlin nach Durchschnittssätzen 6.580 TDM ausgewiesen.

Der Personalstand entwickelte sich wie folgt:

	<u>1.1.89</u>	<u>31.12.89</u>
Leitung	4	4
Wiss. Personal	31	32
Drittmittelpersonal	3	4
Programmierer und DV-Personal	30	27,5
Technisches Personal / Bibliothek	6	6
Verwaltungspersonal	10,5	10,5
Studentische Hilfskräfte	7	6
	=====	
Insgesamt	91,5	90

6.8 Organisationsplan

